

А. В. Андреев

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ
КВАНТОВАЯ
МЕХАНИКА

ЧАСТИЦЫ
И
ЗЕРКАЛЬНЫЕ ЧАСТИЦЫ



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2009

УДК 530.145.1

ББК 22.31

А 65

Андреев А.В. **Релятивистская квантовая механика: частицы и зеркальные частицы.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 628 с. — ISBN 978-5-9221-1076-1.

В книге представлен разработанный автором математический и понятийный аппарат релятивистской квантовой механики на основе волновых уравнений, включающих вторую производную по времени. Показано, что квантовая механика, основанная на таких уравнениях, позволяет объяснить физику целого ряда явлений, не имевших до сих пор последовательной интерпретации.

Книга рассчитана на широкий круг читателей, знакомых с основами квантовой механики, и может служить базой как для общего курса лекций, так и для ряда спецкурсов, посвященных атомной спектроскопии, физике электронно-ядерных процессов в атомах, нейтронной физике и т. д.

ISBN 978-5-9221-1076-1

© ФИЗМАТЛИТ, 2009

© А.В. Андреев, 2009

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	10
Введение	13
Глава 1. Волновые уравнения квантовой механики	22
1.1. Волновая функция	25
1.2. Принцип действия	31
1.3. Преобразования симметрии	36
Глава 2. Преобразования симметрии в нерелятивистской теории	39
2.1. Ортогональные преобразования координат	39
2.2. Скалярные поля	42
2.2.1. Пространственно-временные трансляции (42). 2.2.2. Трехмерные вращения (45). 2.2.3. Функция Лагранжа (50). 2.2.4. Действие частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем (52). 2.2.5. Пространственная инверсия (54). 2.2.6. Обращение времени (56). 2.2.7. Зарядовое сопряжение (57).	
2.3. Спинорные поля	57
2.3.1. Оператор спина (58). 2.3.2. Уравнение Паули (60). 2.3.3. Специфика спинорных волновых функций (62). 2.3.4. Трехмерные вращения (65). 2.3.5. Инверсия спиноров (66). 2.3.6. Связь спинорного и тензорного представлений группы трехмерных вращений (67).	
Глава 3. Преобразования симметрии в релятивистском случае	71
3.1. Группа преобразований Лоренца	71
3.2. Скалярные поля	74
3.2.1. Пространственно-временные сдвиги и вращения (74). 3.2.2. Уравнение Клейна–Гордона–Фока (77). 3.2.3. Неприводимые представления однородной группы Лоренца (80). 3.2.4. Действие для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем (81).	
3.3. Спинорные поля	83
3.3.1. Биспиноры (83). 3.3.2. Спинорное представление однородной группы Лоренца (85). 3.3.3. Трех- и четырехмерные вращения (87). 3.3.4. Действие для релятивистской частицы с полужелтым спином (88).	

Глава 4. Релятивистская скалярная частица	90
4.1. Волновая функция уравнения КГФ и ее свойства	92
4.1.1. Уравнение непрерывности и 4-вектор плотности потока (92).	
4.1.2. Условие ортогональности собственных волновых функций (97).	
4.1.3. Энергия частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем (101).	
4.1.4. Отрицательная вероятность (109).	
4.2. Операторы	114
4.2.1. Билинейные комбинации (115).	
4.2.2. Сохраняющиеся величины (115).	
4.3. Свободная частица	118
4.3.1. Линейно независимые решения (119).	
4.3.2. Волновые пакеты (123).	
4.3.3. Зеркальные частицы и темная материя (128).	
4.4. <i>SPT</i> -преобразования уравнений для частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем	133
4.4.1. Пространственная инверсия, обращение времени и зарядовое сопряжение (135).	
4.4.2. Частица и зарядово-сопряженная частица (138).	
4.4.3. Проективные представления (141).	
Глава 5. Взаимодействие скалярного материального поля с электростатическим полем (частицы и зеркальные частицы)	145
5.1. Скалярные зеркальные частицы	146
5.1.1. Отражение от потенциальной ступеньки (148).	
5.1.2. Зеркальные частицы (150).	
5.1.3. Прямоугольный потенциальный барьер (157).	
5.1.4. Прямоугольная потенциальная яма (159).	
5.1.5. Условие возникновения зеркальных частиц (162).	
5.2. Сохранение заряда в процессе взаимодействия частицы и зеркальной частицы	167
5.2.1. Гауссовские волновые пакеты (167).	
5.2.2. Произвольные волновые пакеты (171).	
5.3. Движение частицы в кулоновском поле	173
5.3.1. Энергетический спектр (174).	
5.3.2. Нормированные волновые функции (175).	
5.3.3. Стандартный базис состояний частицы в кулоновском поле (177).	
5.3.4. Эффективный угловой момент (179).	
5.4. Базис волновых функций отрицательно частотной зоны состояний частицы в кулоновском поле (связанные состояния зеркальных частиц)	180
5.4.1. Нормированная волновая функция (181).	
5.4.2. Подзона состояний отрицательно частотной зоны с положительными собственными значениями (186).	
5.4.3. Глубоколежащие состояния (188).	
5.4.4. Подзона состояний отрицательно частотной зоны с отрицательными собственными значениями (191).	
5.5. Непрерывный спектр состояний в кулоновском поле	191
5.6. Строение атома и атомные процессы в релятивистски инвариантной теории скалярного материального поля	194
5.6.1. Зеркальная симметрия: отрицательный угловой момент (194).	
5.6.2. Процессы в атомах, происходящие с изменением и без изме-	

нения состояния атомного ядра (197). 5.6.3. О связи базисов пространственных волновых функций положительно и отрицательно частотных зон (199). 5.6.4. О полном спектре состояний частицы в кулоновском поле (203).

Глава 6. Взаимодействие скалярной частицы с электромагнитным полем	206
6.1. Взаимодействие мезоатома с электромагнитным полем	208
6.1.1. Сохранение заряда (208). 6.1.2. Уравнения для амплитуд населенности уровней (211). 6.1.3. Векторы электрической и магнитной поляризации (214). 6.1.4. Релятивистски инвариантные соотношения (218).	
6.2. Спонтанный распад	219
6.2.1. Равновесное излучение (220). 6.2.2. Спонтанный распад, обусловленный взаимодействием с поперечным равновесным полем (225). 6.2.3. Межзонные переходы, обусловленные взаимодействием со скалярным полем (<i>K</i> -захват) (228). 6.2.4. Межзонные переходы, обусловленные взаимодействием с поперечным полем (232).	
6.3. Водородоподобный мезоатом	234
6.3.1. Действие для ансамбля заряженных частиц (235). 6.3.2. Водородоподобный мезоатом (237). 6.3.3. Стационарный случай (239). 6.3.4. Энергия ансамбля заряженных частиц (241). 6.3.5. Вариационный принцип (241). 6.3.6. Интегралы движения для водородоподобного мезоатома (246). 6.3.7. Уравнение для волновой функции мезоатома (247).	
6.4. Масса покоя в релятивистской теории	249
6.4.1. Уравнения для амплитуды и фазы волновой функции (250). 6.4.2. Уравнения квантовой магнитной гидродинамики (251). 6.4.3. Масса покоя (253).	
Глава 7. Волновое уравнение для релятивистской частицы с полужелым спином	256
7.1. Волновое уравнение	259
7.2. Связь с уравнением Дирака	261
7.3. Векторы электрической и магнитной поляризации	263
7.4. Тензор энергии-импульса и условие ортогональности собственных волновых функций	266
7.4.1. Стационарная краевая задача (266). 7.4.2. Разложение волновой функции нестационарного уравнения по собственным волновым функциям стационарной задачи (268). 7.4.3. Тензор энергии-импульса (271).	
7.5. Операторы	277
7.5.1. Билинейные комбинации (278). 7.5.2. Операторы (279). 7.5.3. Сохраняющиеся величины (282).	
7.6. Классификация состояний свободной частицы	284
7.6.1. Симметрия решений уравнения для свободной частицы по отношению к зарядовому сопряжению (286). 7.6.2. Квантовые числа,	

определяющие состояние частицы по внутренним степеням свободы (289). 7.6.3. Билинейные комбинации, определяющие состояние материального поля (292). 7.6.4. Спин и спиральность (295).	
7.7. Пространственная инверсия, обращение времени и зарядовое сопряжение	297
7.7.1. Преобразования P_1 и T_1 (298). 7.7.2. Преобразования P_2 и T_2 (299). 7.7.3. Преобразования $P_i T_j$ (301). 7.7.4. Зарядовое сопряжение (302). 7.7.5. CPT -преобразование (302). 7.7.6. Комбинированная PT -четность (303).	
7.8. Частица и античастица	305
Глава 8. Ортогональные биспиноры (квартионные состояния) . . .	309
8.1. Собственные решения спиновой части уравнения	309
8.2. Свойства собственных функций и собственных значений	312
8.2.1. Инвариантность собственных значений (312). 8.2.2. Непригодимые представления однородной группы Лоренца (313).	
8.3. Действительные и мнимые углы вращения	315
8.4. Положительно и отрицательно частотные решения	317
8.5. Спинорное представление	321
8.6. Квартионы	323
8.6.1. Нейтральные (безмассовые) квартаионы (323). 8.6.2. Положительный и отрицательный квартаионы (325). 8.6.3. Магнитное поле (327). 8.6.4. Электрическое поле (328). 8.6.5. Квазиоднородные поля (330). 8.6.6. Общие квартаионные состояния (332). 8.6.7. Взаимодействие с плоской электромагнитной волной (334).	
Глава 9. Зеркальные спинорные частицы	337
9.1. Отражение от потенциальной ступеньки	339
9.2. Коэффициенты отражения и прохождения	343
9.3. Зеркальные частицы	344
9.4. Векторы электрической и магнитной поляризации	351
9.5. Заряд, магнитный и электрический моменты частиц	354
9.5.1. Сохранение заряда (355). 9.5.2. Норма волновой функции (356). 9.5.3. Электрический и магнитный моменты (356).	
9.6. Зависимость коэффициентов отражения и прохождения от состояния падающей частицы	360
9.7. Выводы	364
Глава 10. Взаимодействие нейтральной частицы со стационарными пространственно неоднородными магнитными и электрическими полями	366
10.1. Одномерные задачи рассеяния	367
10.2. Взаимодействие нейтральной частицы со стационарным магнитным полем	370
10.2.1. Взаимодействие нейтрона с магнитным полем (370).	
10.2.2. Рассеяние нейтрона локализованным магнитным по-	

лем (376). 10.2.3. Зависимость коэффициентов отражения и прохождения от состояния падающей частицы (381). 10.2.4. Связанные состояния нейтрона в магнитном поле (383). 10.2.5. Выводы (384).	
10.3. Взаимодействие нейтральной частицы со стационарным электрическим полем	385
10.3.1. Отражение нейтрона электрическим полем (386). 10.3.2. Коэффициенты отражения и прохождения (388). 10.3.3. Электрическая и магнитная поляризация нейтрона, рассеянного электрическим полем (390).	
10.4. Движение нейтрона в суперпозиции электрического и магнитного полей	394
10.4.1. Волновые функции (395). 10.4.2. Случай комплексных собственных значений (397). 10.4.3. Случай действительных и чисто мнимых собственных значений (400). 10.4.4. Зависимость параметров рассеянных частиц от состояния налетающей частицы (402). 10.4.5. Общие кватрионные состояния (405).	
Глава 11. Кватрионные резонансы и процессы рождения частиц и античастиц	407
11.1. Резонансное рассеяние нейтральных частиц электрическим полем	409
11.1.1. Условия резонансного рассеяния (409). 11.1.2. Сохранение энергии (412). 11.1.3. Анализ резонансных условий (415).	
11.2. Резонансное рассеяние заряженных частиц	419
11.2.1. Положительная потенциальная ступенька (419). 11.2.2. Отрицательная потенциальная ступенька (424). 11.2.3. Выводы (426).	
11.3. Прямоугольный профиль поля	429
11.3.1. Общее решение (429). 11.3.2. Магнитное поле (431). 11.3.3. Электрическое поле (434). 11.3.4. Суперпозиция электрического и магнитного полей (438).	
11.4. Отражение от полубесконечного барьера	441
Глава 12. Движение в центрально- и аксиально-симметричном поле	445
12.1. Спин в криволинейных координатах	446
12.1.1. Полный угловой момент (446). 12.1.2. Внешние поля с цилиндрической симметрией (447). 12.1.3. Движение в центрально-симметричном поле (448).	
12.2. Атом геония	450
12.2.1. Движение электрона в однородном магнитном поле (451). 12.2.2. Энергетический спектр (454). 12.2.3. Напряженность индуцированного магнитного поля (455). 12.2.4. Учет электрического поля ловушки (458).	
12.3. Сферические волны	460
12.3.1. Свободная частица (461). 12.3.2. Разложение плоской волны по сферическим волнам (464). 12.3.3. Сходящиеся и расходящиеся сферические волны (465). 12.3.4. Безмассовые сферические кватрионы (468).	

12.4. Движение электрона в кулоновском поле	469
12.4.1. Общее решение (469). 12.4.2. Стандартный базис состояний (472). 12.4.3. Релятивистские поправки: тонкая и сверхтонкая структура стандартного спектра состояний (475). 12.4.4. Сверхтонкая структура атомных спектров: сравнение с экспериментом (479).	
12.5. Базис волновых функций отрицательно частотной зоны состояний частицы в кулоновском поле (связанные состояния зеркальных частиц)	482
12.5.1. Радиальная волновая функция (483). 12.5.2. Подзоны состояний отрицательно частотной зоны с положительными и отрицательными собственными значениями (485). 12.5.3. Глубоколежащие состояния (490).	
12.6. Непрерывный спектр положительных и отрицательных значений энергии	492
12.7. Строение атома и атомные процессы в релятивистски инвариантной теории спинорного материального поля	493
12.7.1. Отрицательный полный угловой момент (зеркальная симметрия) (493). 12.7.2. Киральные состояния частиц (496). 12.7.3. Процессы в атомах, происходящие с изменением и без изменения состояния атомного ядра (498). 12.7.4. Электронно-ядерные 0-0 переходы (500).	
Глава 13. Взаимодействие спинорных частиц с электромагнитным полем	502
13.1. Калибровочное преобразование потенциалов электромагнитного поля	503
13.1.1. Градиентное преобразование (503). 13.1.2. Векторы электрической и магнитной поляризации (505). 13.1.3. Градиентное преобразование потенциалов свободного электромагнитного поля (507).	
13.2. Теория возмущений для взаимодействия атома с электромагнитным полем.	508
13.2.1. Оператор взаимодействия (508). 13.2.2. Волновые функции свободного атома (509). 13.2.3. Уравнения для амплитуд населенности уровней (510). 13.2.4. Угловые зависимости матричных элементов (514). 13.2.5. Правила отбора для электродипольных переходов (516). 13.2.6. Правила отбора для магнитодипольных переходов (521). 13.2.7. Переходы при взаимодействии со скалярным полем (524). 13.2.8. Переходы высокой мультипольности (526).	
13.3. Взаимодействие атома с излучением в резонаторе	527
13.3.1. Уравнения взаимодействия атома с полем в резонаторе (528). 13.3.2. Многоатомная сосредоточенная система (532). 13.3.3. Спонтанный распад в свободном пространстве (533). 13.3.4. Радиационные процессы в одномодовом резонаторе (537). 13.3.5. Радиационный распад в многомодовом резонаторе (540). 13.3.6. Применение гамильтонова подхода к анализу задач взаимодействия излучения с атомом (545).	

Глава 14. Нелинейно оптический отклик атома в сильном лазерном поле	553
14.1. Отклик атома в сильном лазерном поле.	555
14.1.1. Краевая задача для свободного атома и атома, взаимодействующего с внешним полем (555). 14.1.2. Уравнения для амплитуд населенности уровней (559). 14.1.3. Калибровочная инвариантность (562). 14.1.4. Поле отклика атома (563). 14.1.5. Атом в лазерном поле релятивистской напряженности (565).	
14.2. Симметричные свойства матричных элементов	566
14.2.1. Матричные элементы (567). 14.2.2. Матричные элементы (568). 14.2.3. Энергетические сдвиги (571). 14.2.4. Матричные элементы ионизационных переходов (572). 14.2.5. Учет эффектов пространственной дисперсии (574). 14.2.6. Циркулярная поляризация (575).	
14.3. Спектр отклика атома.	576
14.3.1. Одноуровневое приближение (576). 14.3.2. Теория возмущений (580). 14.3.3. Двухуровневое приближение (583). 14.3.4. Нелинейно-оптический отклик атома в лазерном поле (585).	
Глава 15. Атом водорода	589
15.1. Действие для системы частиц, взаимодействующих с электромагнитным полем	589
15.2. Уравнения для электромагнитного поля	592
15.2.1. Стационарные поля (592). 15.2.2. Симметричная форма уравнений для электромагнитного поля (594).	
15.3. Водородоподобный атом	597
15.3.1. Общая задача (597). 15.3.2. Энергия ансамбля частиц (597). 15.3.3. Стационарный случай (599). 15.3.4. Интегралы движения для водородоподобного атома (603). 15.3.5. Угловые зависимости волновых функций водородоподобного атома (604). 15.3.6. Матричные элементы операторов сверхтонких взаимодействий (608). 15.3.7. Уравнения для радиальных волновых функций (613). 15.3.8. Теория возмущений (615). 15.3.9. Случай $j = 0$ (616). 15.3.10. Внутренняя четность (618).	
Список литературы	622
Предметный указатель	624

Предисловие

Дискретность спектров излучения атомов послужила одним из основных стимулов развития квантовой механики, т. е. волновой теории материального поля. Действительно, уже «простая» боровская модель атома позволила объяснить природу возникновения дискретных спектров, поскольку рассчитываемые с помощью указанной модели спектры излучения щелочных атомов достаточно хорошо совпадали с экспериментальными данными, имеющимися в то время. При характеристике боровской модели термин «простая» мы поставили в кавычки прежде всего потому, что именно простота модели, по-видимому, помогла Шредингеру перевести эту модель на язык математических уравнений и тем самым заложить основы волновой теории материального поля, придав ей форму строгой математической теории.

Традиционно квантовая механика воспринимается как теория строения атомоподобных структур, т. е. как теория, объясняющая существование стационарных состояний многочастичных систем заряженных частиц с размерами порядка ангстрема ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$). Единица измерения *ангстрем* определяет характерное расстояние между электронами и ядром атомов. Как видно, значительное различие между характерными масштабами макроскопических тел и атомоподобных структур приводит к необходимости кардинальной перестройки методов описания материи, заключающейся в переходе от представлений классической механики, базирующихся на модели частицы как точечном объекте, к модели волнового материального поля.

Следующей известной стабильной многочастичной системой является ядро атома. Отметим, однако, что ядра атомов, так же как и сами атомы, являются на самом деле квазистабильными, но на привычных нам временных интервалах их можно рассматривать как стабильные многочастичные системы. Характерный пространственный масштаб расстояний между частицами, составляющими ядро атома, еще более уменьшается и составляет величину порядка ферми ($1 \text{ ферми} = 10^{-14} \text{ см}$). В силу аналогии между различием аппаратов описания макроскопических тел и атомов естественно предположить, что математический аппарат ядерной физики должен также отличаться от математического аппарата атомной физики. Вместе с тем вполне естественно предположить, что существуют единые закономерности движения материи на различных уровнях организации, а возникающие отличия в описании связаны с наблюдателем, т. е. с нашими попытками уложить наблюдаемые явления в рамки математических формул.

Не претендуя на создание общего аппарата описания материи, мы хотим здесь показать, что переход от волновых уравнений материального поля, линейных по оператору временной производной, к волновым уравнениям, включающим вторую временную производную, кардинально меняет картину строения материи, позволяя объединить атомные и ядерные процессы. Причина доминирующего развития волновой теории материального поля в направлении использования волновых уравнений с первой производной по времени вполне понятна и связана с возникшими в момент зарождения теории проблемами интерпретации смысла волновой функции. Вероятностная интерпретация волновой функции, безусловно, сыграла решающую роль в развитии волновой теории материального поля. Действительно, идея о том, что измеряемым величинам соответствуют квантово-механические средние, дала основу для экспериментальной проверки результатов теории.

Переход от волновых уравнений, линейных по оператору временной производной, к волновым уравнениям, включающим вторую производную по времени, с неизбежностью приводит к необходимости введения понятия отрицательной вероятности. Предлагаемая нами интерпретация отрицательной вероятности состоит в том, что она определяет вероятность обнаружения зеркальных частиц. Отметим, что появление зеркальных частиц как структурных элементов материального поля переводит квантовую механику из рамок теории, объясняющей лишь явления микромира, в рамки теории, объясняющей явления космологического масштаба. Действительно, учет решений волновых уравнений, отвечающих состояниям зеркальных частиц, позволяет дать последовательную непротиворечивую интерпретацию существования «темной материи».

Излагаемая в книге теория волновых уравнений со второй производной по времени базируется на двух уравнениях: уравнении Клейна–Гордона–Фока для скалярных материальных полей и кватрионном уравнении для спинорных материальных полей. Термин *кватрионное уравнение* мы используем впервые в этой книге, и его введение обусловлено тем, что общее решение указанного уравнения выражается через четыре ортогональных биспинора, которые мы связываем с элементарными возбуждениями материального поля — *кватрионами*. Это уравнение было предложено нами около десяти лет назад и подверглось поначалу достаточно интенсивной критике, утверждавшей, что, с одной стороны, квантовая механика спинорного поля должна базироваться на уравнении Дирака и, с другой стороны, уравнение сходно с квадратированным уравнением Дирака. Именно эта критика послужила для нас одним из стимулов развития математического аппарата волновых уравнений со второй производной по времени, который существенно отличается от математического аппарата волновых уравнений, линейных по оператору временной производной. Уже в ранних работах мы показали, что в частном случае, когда величина магнитного момента электрона совпадает с магнетонном Бора, кватрионное уравнение фак-

торизуется, поэтому и уравнение Дирака, и квадрированное уравнение Дирака являются частными случаями квартионного уравнения. Однако даже незначительное отличие магнитного момента электрона от магнетона Бора приводит к целому ряду качественно новых явлений, среди которых можно указать, например, парамагнетизм свободных электронов, сверхтонкую структуру водородоподобных атомов, *СРТ*-инвариантный механизм электрического дипольного момента спинорных частиц и ряд других явлений, о которых пойдет речь в настоящей книге. Не менее принципиальным является тот факт, что пространство состояний материальных полей, описываемых волновыми уравнениями со второй временной производной, вдвое шире пространства состояний любых волновых уравнений, линейных по оператору временной производной. Это обстоятельство и лежит в основе последовательной теории зеркальных частиц.

Считаю своим приятным долгом выразить благодарность всем сотрудникам Международного лазерного центра и кафедры общей физики и волновых процессов физического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова, где мне посчастливилось многие годы работать. Широкий спектр научных интересов членов этого коллектива и царящая в нем доброжелательная атмосфера создают благоприятный климат для свободного научного поиска. Особую признательность хочу выразить сотрудникам, аспирантам и студентам, работающим вместе со мной в лаборатории теоретических проблем оптики. Без их поддержки период подготовки рукописи к печати занял бы гораздо большее время. Я глубоко признателен моим родным. Лишь их долготерпение и чуткое отношение к моей работе позволили мне написать эту книгу.

Введение

Квантовая механика является в настоящее время одной из основных теорий строения материи и основана на использовании понятия материального поля для описания состояния частиц, составляющих структуру материи. Столетняя история развития и совершенствования аппарата квантовой механики и ее широкого применения для описания разнообразных явлений, происходящих в окружающем нас мире, несомненно, свидетельствует о справедливости основополагающих принципов этой теории. Сегодня невозможно представить, что дальнейшее развитие науки будет происходить без использования аппарата и методов квантовой механики, поскольку наноструктуры стали основным объектом не только научных исследований, но и целенаправленного синтеза. Несмотря на колоссальный авторитет квантово-механических представлений в объяснении основополагающих принципов строения материи, в последнее время возник ряд проблем, которые ставят вопросы общетеоретического плана и заставляют вновь обратиться к анализу основ квантовой механики.

К их числу можно отнести проблемы темной материи (см., например, обзор [1]), зеркальных частиц (см. обзор [2]), собственного электрического момента частиц (см. обзоры [3, 4]), изменение массы мезонов при их движении внутри ядер ([5–7]) и т.д.¹⁾ С одной стороны, существуют неоспоримые экспериментальные свидетельства существования перечисленных объектов, явлений или характеристик состояния частиц, с другой стороны, на сегодняшний день нет общей теории, которая позволила бы последовательным образом включить всю специфику и все многообразие наблюдаемых явлений в рамки единого квантово-механического формализма. Мы не говорим о полном отсутствии каких-либо теорий. Однако, как правило, предлагаемые теории основаны на введении в функцию Лагранжа дополнительных слагаемых, которые могли бы привести к ожидаемому результату, т.е., по сути, речь идет о полуэмпирическом введении новых типов взаимодействий или состояний частиц материального поля.

¹⁾ При ссылках на результаты исследований мы будем цитировать, как правило, обзорные статьи. К сожалению, не все они в равной степени отражают статус современного состояния исследований по соответствующим направлениям. Тем не менее, на наш взгляд, приводимые ссылки могут оказаться полезными и дают дополнительную информацию при использовании различных поисковых систем.

Предлагаемая вниманию читателя книга посвящена развитию математического аппарата релятивистских волновых уравнений, включающих вторую производную по времени. В случае скалярных материальных полей уравнением такого типа является уравнение Клейна–Гордона–Фока (КГФ) [8–10], а в случае спинорных полей — квартионное уравнение, предложенное нами в работах [11, 12] (см. уравнение (7.2) настоящей книги). Переход от волновых уравнений материального поля, основанных на использовании уравнений первого порядка по временной производной, к волновым уравнениям, включающим вторую производную по времени, приводит к необходимости коренной перестройки не только математического аппарата, но и базовых понятий и положений теории.

Необходимость такой перестройки вполне очевидна, поскольку переход от волновых уравнений с первой временной производной к уравнениям, включающим вторую временную производную, приводит к удвоению релятивистских степеней свободы движения частицы. Встает естественный вопрос: каким состояниям материального поля отвечают появляющиеся дополнительные степени свободы? Переход к уравнениям второго порядка по временной производной с неизбежностью ведет к тому, что временная компонента 4-вектора плотности потока материального поля, $j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho)$, перестает быть билинейной комбинацией волновой функции и сопряженной волновой функции и становится билинейной комбинацией волновой функции и временной производной сопряженной волновой функции. Как результат $\rho(\mathbf{r}, t)$ перестает быть положительно определенной величиной и может принимать отрицательные значения, поскольку общее решение уравнения второго порядка по временной производной включает как положительно, так и отрицательно частотные решения. Поскольку согласно уравнению непрерывности $\rho(\mathbf{r}, t)$ определяет плотность вероятности обнаружения частицы в точке \mathbf{r} в момент времени t , то в рамках теорий, квадратичных по оператору временной производной, возникает проблема отрицательной вероятности.

Один из путей устранения проблемы отрицательной вероятности состоит в факторизации оператора уравнения КГФ, т. е. преобразовании указанного оператора к виду произведения двух операторов, линейных по оператору временной производной. Такая факторизация, как известно, приводит к уравнению Дирака ([13–15]). Однако, как это ни парадоксально, указанная факторизация не решает проблемы отрицательной вероятности. Это обстоятельство было отмечено Клейном [16] вскоре после появления публикации Дирака. Анализируя задачу об отражении частицы от прямоугольного потенциала, Клейн отметил, что из решения уравнения Дирака следует, что если высота потенциального барьера превышает удвоенную массу покоя частицы, то коэффициент отражения принимает значения, большие единицы, а коэффициент прохождения становится отрицательным. Парадокс Клейна, несмотря на восьмидесятилетнюю историю, так и не нашел последовательной

интерпретации (см., например, обзор [17]). В последнее время интерес к парадоксу Клейна был стимулирован исследованиями по проблеме движения носителей заряда в графене (см., например, обзор [18]) и, в частности, возможностью создания линзы Веселаго [19] на основе графена.

Отметим, кстати, одну интересную деталь. В настоящей книге мы покажем, что аналогичные изменения в величине коэффициентов отражения и прохождения возникают и в случае, когда задача отражения частицы от потенциальной ступеньки анализируется на основе уравнения КГФ. Однако исторически это обстоятельство осталось незамеченным даже самим Клейном. Это, по-видимому, обусловлено тем, что теория Дирака сразу же после ее появления заняла доминирующие позиции, поскольку позволила объяснить наличие собственного углового момента электрона и, как считалось в то время, предсказала существование позитрона.

Методологические трудности в интерпретации решений волновых материальных уравнений со второй производной по времени не ограничиваются лишь проблемой отрицательной вероятности. Исторически первой была, по-видимому, проблема отрицательно частотных решений. Суть ее состоит в том, что решение волнового уравнения, квадратичного по оператору 4-импульса $p_\mu = -i\hbar \partial/\partial x_\mu$, для комплексной волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ содержит как положительно, так и отрицательно частотные решения. Если временную часть оператора 4-импульса связать с оператором энергии $\hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$, то, например, для свободной частицы соотношение между энергией и импульсом принимает вид: $E(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$. В то время как положительная энергия растет с ростом p , отрицательная энергия уменьшается с ростом величины импульса. Поскольку последняя зависимость противоречит закономерностям классической механики, Шредингер предположил, что волны материи описываются не релятивистски инвариантным волновым уравнением, а уравнением с первой производной по времени, которое приводит к нерелятивистским соотношениям между энергией и импульсом, $E = p^2/2m_0$. С. Вайнберг [20], ссылаясь на работы П. А. М. Дирака [21–23], пишет: «Шредингер сначала вывел релятивистское уравнение, но затем начал сомневаться в его справедливости, поскольку оно неправильно описывало тонкую структуру атома водорода. Через несколько месяцев он осознал, что нерелятивистское приближение релятивистского уравнения важно само по себе, даже если его исходное уравнение неверно! К тому времени, когда Шредингер собрался опубликовать свое релятивистское волновое уравнение, оно уже было независимо переоткрыто...»

Традиционная интерпретация проблемы отрицательной энергии состоит в следующем: полагается, что положительно частотные решения отвечают состояниям частицы, а отрицательно частотные — состояниям античастицы. Однако такую интерпретацию нельзя считать вполне

последовательной, поскольку в ее рамках зарядово-сопряженная частица (т. е. частица, имеющая ту же массу, но противоположный заряд) однозначно совпадает с античастицей. Например, позитрон и антиэлектрон представляют собой одно и то же состояние материального поля. Однако такая интерпретация вступает в противоречие с экспериментально наблюдаемыми явлениями. Действительно, экспериментально установлено, что электрон и позитрон могут образовывать связанную нейтральную структуру, которая называется атомом позитрония. Имеются многочисленные экспериментальные данные, описывающие спектр состояний указанной атомной системы [24, 25]. Точный теоретический расчет спектров состояний атома позитрония, как и спектров других водородоподобных атомов, может быть проведен на основе решения двухчастичной квантово-механической задачи, волновая функция которой зависит от координат обеих частиц, составляющих атом. Это означает, что электрон и позитрон должны рассматриваться как две равноправные частицы, занимающие различные состояния в пространстве состояний физически наблюдаемых частиц материального поля. Их различие состоит лишь в том, что они, обладая одинаковыми свойствами по отношению к взаимодействию с гравитационным полем, имеют противоположный электрический заряд. Следовательно, они обе должны принадлежать одной и той же зоне состояний материального поля, т. е. обе должны описываться, например, положительно частотными решениями квантово-механических уравнений. Иначе спектр атома позитрония должен был бы определяться решением уравнения для одночастичной волновой функции. Вместе с тем трудно представить, как в рамках линейной квантовой механики два линейно независимых решения одного и того же уравнения могут отвечать связанным состояниям. Это возможно лишь только в том случае, когда уравнения являются неоднородными, т. е. содержат правую часть, не зависящую от волновой функции. Однако такая интерпретация применяется по отношению к решениям линейных однородных уравнений квантовой механики.

Следует отметить, что проблема интерпретации отрицательно частотных решений послужила одним из основных стимулов к развитию теории вторичного квантования. В этом случае амплитуды положительно и отрицательно частотных решений объявляются некоммутирующими операторами, действие которых на волновую функцию вакуумного состояния приводит к различным состояниям частицы. Теория вторичного квантования приняла на сегодняшний день достаточно самосогласованную форму. Одним из основных достижений этой теории является инвариантная теория возмущений, позволяющая представлять процессы взаимодействия частиц друг с другом и с внешними полями в виде суммы элементарных процессов.

Несмотря на огромный авторитет этой теории в объяснении широкого круга явлений, остаются, однако, вопросы общетеоретического плана. Во-первых, в рамках этой теории имеются существенные различия в описании бозонов и фермионов. В чем причина указанной

неэквивалентности? Исторически это предположение базируется на результатах экспериментальных наблюдений, показывающих, что два электрона с одинаково направленными спинами не могут находиться бесконечно близко друг к другу. Это экспериментально наблюдаемое свойство частиц можно, конечно же, сформулировать в виде постулата, накладывающего ограничения на вид волновых функций (или операторов), описывающих состояние указанных частиц. Однако эта специфика поведения частиц, имеющих внутренние степени свободы, и, следовательно, обладающих собственным магнитным моментом, находит наглядную интерпретацию и в рамках волновой механики. Действительно, гамильтониан взаимодействия магнитных моментов двух фермионов, совпадающий по своей структуре с соответствующим выражением классической электродинамики, прекрасно объясняет экспериментально наблюдаемые закономерности. Вместе с тем собственный магнитный момент скалярных частиц, не обладающих внутренними степенями свободы, равен нулю, поэтому гамильтониан их взаимодействия соответствующего слагаемого включать не может. Следовательно, их взаимное расположение в пространстве будет определяться лишь закономерностями, присущими кулоновскому взаимодействию. Во-вторых, что такое вакуумное состояние поля? Изначально полагается, что оно не зависит от статистики частиц и одинаково во всех точках пространства–времени. Считается, что наличие зарядов приводит к поляризации поля поправкам, искажающим состояние вакуума материальных полей заряженных частиц. Вместе с тем кулоновский потенциал является расходящимся, поэтому вряд ли при описании искажения вакуумного поля можно ограничиться поправками. Однако наибольшие сомнения в обоснованности представления о вакуумных состояниях поля вызывает то обстоятельство, что энергия вакуума является бесконечной. В-третьих, если амплитуды отрицательно и положительно частотных решений являются соответственно операторами рождения и уничтожения одной и той же частицы, то, казалось бы, состояния частицы и античастицы являются полностью равноправными, а следовательно, количество атомов и антиатомов должно быть одинаково. В чем причина отсутствия указанной симметрии в окружающем нас мире? В-четвертых, наиболее наглядную интерпретацию метод вторичного квантования имеет в представлении плоских волн. Состояние частицы в виде плоской волны является в значительной степени математической абстракцией, более реалистичной является модель волнового пакета. Вместе с тем представление состояния фермиона в виде операторного волнового пакета приводит к математическим противоречиям при переходе к классическому пределу. Однако необходимо отметить, что нерелятивистское уравнение Шредингера вполне согласуется с представлением состояния электрона в виде волнового пакета, а результаты соответствующих расчетов прекрасно согласуются с результатами наблюдаемых явлений в нерелятивистской области энергий.

Список возникающих вопросов можно продолжить. Например, не вполне убедительным выглядит привлечение эффектов несохранения четности для объяснения ряда реакций распада частиц. Вместе с тем инвариантность волновых уравнений относительно *CPT*-преобразований является одним из базовых принципов лагранжева формализма, отражающим фундаментальные свойства пространства–времени. В пользу существования картины мира, не нарушающей указанных симметрий, свидетельствуют отрицательные результаты экспериментов по измерению электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтронов, электронов, атомов [3, 4]. В последние 50 лет были проведены многочисленные эксперименты по измерению ЭДМ, в которых предполагалось, что механизм ЭДМ связан с нарушением *CP*- или *T*-четности. До сегодняшнего дня не удалось не только измерить величину ЭДМ, но даже и получить указания на его существование. Как мы отмечали выше, в рамках теорий, основанных на уравнениях, включающих вторую производную по времени, пространство состояний материального поля удваивается. Как результат удваивается и число преобразований *CPT*-симметрии. В рамках таких теорий не только появляется *CPT*-инвариантный механизм собственного электрического момента частиц, но меняется и представление о собственном магнитном моменте частиц. Например, у свободной частицы сохраняющейся величиной является не только спиральность, но и спин, а следовательно, магнитный момент свободной частицы также является сохраняющейся величиной. Это и неудивительно, поскольку вошедшие сегодня в повседневную практику методы исследования вещества с помощью пучка поляризованных частиц (нейтронов, электронов и т. д.) были бы невозможны, если бы спин частицы на пути от поляризатора до исследуемого объекта хаотически менял свое направление. Как мы покажем в настоящей книге, постановка экспериментов по измерению ЭДМ, основанная на предположении о его *CP*-неинвариантном механизме, в принципе не позволяет измерить величину *CPT*-инвариантного ЭДМ.

Успехи, достигнутые в последнее время в области прецизионных методов лазерной спектроскопии [25–27], позволили с высокой степенью точности измерять сверхтонкую структуру атомных спектров. Это стимулировало многочисленные исследования по применению квантово-электродинамических методов для расчета атомных спектров [27–30]. Следует, однако, отметить, что расчеты, производимые в рамках аппарата теории квантованных полей, совпадают с экспериментальными данными лишь при использовании процедуры перенормировки, необходимость которой обусловлена неизбежно возникающими в теории расходимостями. Эти расходимости возникают даже при расчете спектра связанных состояний частицы в кулоновском поле. Несмотря на совпадение результатов окончательных расчетов с экспериментальными данными, использование этой процедуры вызывает определенную неудовлетворенность, связанную с тем, что в теории появляются дополнительные (в определенной степени произвольные)

свободные параметры, позволяющие привести значения материальных параметров частиц (например, величины магнитного момента, массы и т. п.) к их экспериментально измеряемым значениям. Параметром малости инвариантной теории возмущений является параметр $Z\alpha$, где Z — заряд ядра атома, а α — постоянная тонкой структуры. Как известно, область существования стабильных атомов ограничена условием $Z\alpha \leq 1$, поэтому, казалось бы, указанное ограничение является несущественным. Однако мы покажем, что нестабильность атомных систем при $Z\alpha \rightarrow 1$ обусловлена тем, что начинают совпадать энергии связанных состояний частицы и зеркальной частицы в кулоновском поле. При этом энергии связи указанных состояний оказываются сравнимы с массой покоя частицы. Трудно предположить, что какой-либо вариант теории возмущений, использующий в качестве параметра малости величину $Z\alpha$, может позволить рассчитать спектр состояний атома, включающих состояния с энергией связи порядка массы покоя частицы, и тем самым дать последовательную интерпретацию причины нестабильности атомных систем, возникающей при $Z\alpha \rightarrow 1$.

* * *

Одна из основных целей книги — показать, как перечисленные выше проблемы решаются в рамках квантовой теории поля, основанной на волновых уравнениях, включающих вторую производную по времени. Как мы отмечали выше, в любой теории комплексных волновых полей, описываемых волновым уравнением со второй производной по времени, с неизбежностью возникает понятие отрицательной вероятности, поэтому оно становится одним из центральных понятий теории. Введение в теорию понятия отрицательной вероятности существенно расширяет пространство состояний материальных полей и позволяет построить последовательную теорию зеркальных частиц. Как мы увидим, процессы, происходящие с участием частиц и зеркальных частиц, могут происходить лишь во внешних полях существенно релятивистской напряженности. При анализе явлений в субрелятивистской области понятие отрицательной вероятности перестает играть существенную роль, а получаемые результаты совпадают с результатами расчетов, основанных на использовании традиционных подходов.

Последовательная интерпретация состояний материального поля, отвечающих зеркальным частицам, может быть получена, если состояние частицы задается в виде волнового пакета, а не плоской волны. Модель плоских волн является абстрактной математической моделью и неразрывно связана с бесконечно большим пространственным объемом. Однако гиперплоскость $S_4 = V(t)$ является лишь одной из четырех гиперплоскостей трехмерной размерности в четырехмерном пространстве. Релятивистски инвариантные соотношения не должны зависеть от того, какую из четырех указанных гиперплоскостей мы используем, поэтому понятие бесконечно большого пространственного объема не является полностью определенным понятием в релятивистской теории. Более последовательной моделью состояния части-

цы является модель пространственно ограниченного волнового пакета. Волновая функция в этом случае может считаться малой на границе произвольного трехмерного объема. Различия между волновым пакетом и плоской волной касаются не только математического описания, но и имеют серьезные физические следствия. Дело в том, что скорость переноса энергии волновым пакетом определяется не фазовой скоростью, а групповой. Следовательно, групповая скорость выступает в качестве физически наблюдаемой величины и ее значение существенно влияет на характер взаимодействия частиц. Действительно, исследования в области распространения лазерных импульсов неоспоримо показывают, что эффективность процессов нелинейно оптического преобразования лазерных импульсов, в особенности ультракоротких лазерных импульсов, зависит от выполнения как условий фазового синхронизма, так и условий группового синхронизма. Именно использование модели волновых пакетов позволяет дать наглядную физическую интерпретацию понятия зеркальных частиц.

В теории спинорных полей, описываемых волновым уравнением со второй производной по времени, состояния с отрицательной вероятностью связываются не только с зеркальными частицами, но и с античастицами. При этом, однако, состояния античастиц не связываются с отрицательно частотными решениями. Античастица описывается решением волнового уравнения, отвечающим заряду со знаком, противоположным знаку заряда частицы. Понятий *частица* и *античастица* недостаточно для того чтобы описать все возможные состояния спинорного материального поля. Мы покажем, что в теории спинорных полей естественным образом возникают четыре линейно независимых решения. Такая структура общего решения уравнения (7.2) привела нас к необходимости введения понятия *квартиона* как элементарного возбуждения материального поля, отвечающего каждому из линейно независимых решений. Состояния частиц являются суперпозицией квартаонов, в результате чего состояние частиц характеризуется не только зарядом, но и электрическим и магнитным моментами, величина которых зависит от соотношения амплитуд квартаонных состояний. Именно квартаоны являются базовыми структурными элементами спинорного материального поля, обеспечивающими симметрию относительно *CPT*-преобразований.

Каждый из квартаонов может отвечать как положительно, так и отрицательно частотным решениям. Следует, однако, отметить, что разделение решений волновых уравнений на положительно и отрицательно частотные является более или менее строгим лишь в случае свободной частицы. В случае частицы, взаимодействующей с внешним пространственно неоднородным полем, два различных собственных значения, неизбежно возникающие в рамках волновых уравнений со второй производной по времени, могут иметь одинаковый знак. Это наглядно свидетельствует о том, что систематика состояний частиц, основанная на анализе решений уравнений для свободной частицы, не

может дать адекватного представления об отличительных свойствах частиц, отвечающих тем или иным решениям волновых уравнений.

Материал книги можно условно разбить на три части. Главы 1–3 посвящены применению лагранжева формализма в теории волновых материальных полей. Эти главы являются вводными и посвящены обсуждению основных принципов, которые лежат в основе конструирования действия. Главы 4–6 посвящены развитию теории скалярных материальных полей, описываемых волновыми уравнениями со второй производной по времени. В гл. 4 развивается математический аппарат теории указанных уравнений. В гл. 5 указанный аппарат применяется для анализа задач движения частицы в стационарных внешних полях. Глава 6 посвящена анализу задач взаимодействия с нестационарными электромагнитными полями и анализу двухчастичных задач. Главы 7–15 посвящены развитию теории спинорных материальных полей, описываемых волновыми уравнениями со второй производной по времени. Наличие внутренних степеней свободы у спинорной частицы, с одной стороны, приводит к необходимости дальнейшего развития математического аппарата и, с другой стороны, существенно расширяет физику взаимодействия частиц. Поэтому неудивительно, что обсуждение теории спинорных материальных полей занимает существенно больший объем книги.

Как следует из приведенного выше обсуждения, теория материальных полей, основанная на использовании волновых уравнений со второй производной по времени, существенно отличается от аналогичной теории, основанной на использовании уравнений, линейных по оператору временной производной. Эти отличия приводят и к появлению принципиально новых физических следствий. Естественно, что в рамках одной книги невозможно продемонстрировать весь круг возникающих различий, поэтому мы остановимся, в основном, на рассмотрении примеров, где теория демонстрирует свою предсказательную силу.

К таким следствиям общей теории можно отнести:

— последовательную теорию зеркальных частиц, позволяющую дать физическую интерпретацию таких астрофизических терминов, как «темная материя», «черные дыры» и т. п.;

— объяснение изменения массы покоя частиц при их взаимодействии с электромагнитным полем и расчет зависимости массы покоя от напряженности электрического и магнитного полей;

— теорию собственного электрического дипольного момента частиц с полуцелым спином;

— теорию рассеяния нейтральных частиц (в частности, нейтронов) электрическим полем;

— объяснение природы лэмбовского сдвига и расчет сверхтонкой структуры водородоподобных атомов;

— предсказание парамагнетизма свободных электронов;

— объяснение механизмов K -захвата, β^+ - и β^- -распада, процессов рождения и взаимного преобразования частиц и т. д.

Глава 1

ВОЛНОВЫЕ УРАВНЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Волновые уравнения квантовой механики отражают наличие волновых свойств микрочастиц. Представления о волновых свойствах материальных частиц были востребованы для объяснения экспериментально наблюдаемых явлений. Именно эта плодотворная идея позволила объяснить дискретность спектров излучения атомов и лежит в основе современных представлений о строении вещества. В настоящее время имеется обширная литература по квантовой механике и атомной спектроскопии, где содержится подробный обзор исторического развития представлений о волновой структуре частиц, поэтому мы не будем здесь обращаться к подробному обсуждению этого вопроса.

Вскоре после возникновения волновой механики начало активно развиваться и альтернативное направление, связанное с использованием операторов, соответствующих тем или иным физически наблюдаемым величинам. В пространстве произвольной размерности есть базовый набор линейно независимых операторов, которые не коммутируют друг с другом, и именно это свойство некоммутативности служит основой для объяснения дискретной структуры материи, при этом масштаб дискретности определяется видом коммутационных соотношений.

Эти два направления были позже объединены в рамках квантовой электродинамики, которая основана на использовании процедуры вторичного квантования, т.е. на замене амплитуд волновых полей операторами, подчиняющимися тем или иным перестановочным соотношениям. Теория квантованных полей является доминирующим подходом в современной квантовой теории частиц, воспринимаемых как элементарные возбуждения волнового материального поля.

Параллельно с указанными направлениями развивалась и общая теория волновых материальных полей, основанная на применении лагранжева формализма. В рамках такого подхода за основу берутся не сами волновые материальные уравнения, а выражения для действия или функции Лагранжа, которые с применением канонических процедур позволяют получать волновые уравнения.¹⁾ Ясно, что выражения для действия, так же как и вид волновых уравнений, в конечном

¹⁾ Следует отметить, что традиционно лагранжев формализм применяется в рамках теории вторичного квантования, т.е. при переходе от квантовой механики к теории квантованных полей (см., например, [31–33]). Мы, однако, будем его здесь использовать, оставаясь в рамках квантовой механики.

счете постулируются, а не выводятся. Тем не менее, несмотря на это, лагранжев формализм все же является более общим подходом. Это обусловлено следующими причинами.

Во-первых, вид функции Лагранжа свободного материального поля в значительной степени детерминируется необходимостью соответствия основным пространственно-временным симметриям. В случае линейных волновых уравнений это требование оставляет практически лишь свободу выбора постоянных коэффициентов, входящих в выражение для функции Лагранжа свободной частицы. Поэтому анализ функции Лагранжа, отвечающий тем или иным волновым уравнениям, позволяет в значительной степени предсказать общие свойства решений различных волновых уравнений.

Во-вторых, наиболее принципиальное значение лагранжев формализм имеет в теории взаимодействующих полей. Принцип аддитивности действия позволяет на основе выражений для действия различных материальных полей получать действие для произвольной системы взаимодействующих полей, в то время как в волновые уравнения потенциалы взаимодействия с различными внешними полями вводятся, как правило, на основе полужемпирических соображений.

В-третьих, лагранжев подход в теории электромагнитного поля был развит значительно ранее и, по сути дела, он был перенесен в теорию волновых материальных полей. Поэтому использование функции Лагранжа электромагнитного поля и канонической подстановки $p_\mu \rightarrow p_\mu - qA_\mu/c$ позволяет легко обобщать уравнения свободной частицы на случай частиц, взаимодействующих с электромагнитным полем. Каноническая подстановка, естественно, позволяет также обобщать уравнения для свободной частицы на случай частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем. Однако в случае взаимодействующих полей волновых уравнений недостаточно для полного описания системы. Наряду с волновыми уравнениями, важную роль играют динамические инварианты, т. е. комбинации волновых функций и их производных, не изменяющиеся во времени. Лагранжев формализм дает последовательную процедуру получения динамических инвариантов. Сохраняющиеся во времени комбинации волновых функций и их производных можно получать и исходя из уравнений для поля, однако в случае полей, описываемых многокомпонентными волновыми функциями, получающиеся выражения отличаются от динамических инвариантов, следующих из функции Лагранжа. Примером может служить уравнение непрерывности, являющееся базовым соотношением любой волновой теории. Пространственный интеграл от уравнения непрерывности определяет условие нормировки волновых функций материального поля. Вместе с тем хорошо известно, что выражение для 4-вектора плотности тока, получаемое на основе умножения уравнения Паули на эрмитово-сопряженную волновую функцию ψ^+ , не содержит слагаемого $\mathbf{j}_s = \mu_{BC} \text{rot}(\psi^+ \boldsymbol{\sigma} \psi)$. Наличие или отсутствие этого слагаемого в выражении для плотности тока не влияет на справедливость

уравнения непрерывности, поскольку $\operatorname{div}(\operatorname{rot} \mathbf{f}) \equiv 0$ для произвольной векторной функции $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$. Однако отсутствие этого слагаемого в выражении для плотности тока приводит к существенному изменению поля отклика частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем.

Одна из целей настоящей книги состоит в том, чтобы показать, что квантовая теория поля, основанная на применении канонического лагранжева формализма и исследовании симметричных свойств волновых уравнений, следующих из выбранного действия, является альтернативным подходом к теории частиц. Если отказаться от требования положительной определенности временной компоненты 4-вектора плотности потока, то такой подход позволяет описывать процессы рождения и взаимного преобразования частиц, не прибегая к теории вторичного квантования, предполагающей наличие вакуумных полей («электромагнитного вакуума», «вакуума электронно-позитронных пар» и т. п.) В результате процессы рождения и взаимного преобразования частиц получают более наглядную физическую интерпретацию.

Релятивистски инвариантная функция Лагранжа должна быть квадратичной формой оператора 4-импульса. В случае скалярных полей релятивистски инвариантное выражение для функции Лагранжа приводит к уравнению КГФ, а в случае спинорных полей — к уравнению (7.2) настоящей книги. Как мы уже отмечали в предисловии, переход от волновых уравнений с первой производной по времени к волновым уравнениям, включающим вторую производную по времени, приводит к необходимости кардинальной перестройки не только математического аппарата, но и базовых принципов теории. Изменяются вид условий ортогональности собственных волновых функций, определение квантово-механических средних операторов и т. п. Возникает необходимость введения новых терминов, таких как «отрицательная вероятность», «зеркальные частицы», «квартионы» и т. д. Важным следствием указанных изменений является то обстоятельство, что возникающая теория не только дает альтернативную интерпретацию известных явлений, но и обладает предсказательной силой.

В работах [11, 12, 34–36] мы показали, что теория сверхтонкой структуры водородоподобных атомов, изложенная в гл. 12, 15 настоящей книги, позволяет рассчитывать величину лэмбовского сдвига с точностью, совпадающей с точностью квантово-электродинамических расчетов, и дает наглядную физическую интерпретацию причины его возникновения. В работах [37, 12] был впервые предложен механизм рассеяния нейтрона электрическим полем, основанный на взаимодействии собственного электрического момента нейтрона с электрическим полем. Предложенный механизм объясняет отрицательные результаты экспериментов по измерению ЭДМ нейтрона, проведенных в последние 50 лет, в которых полагалось, что механизм ЭДМ связан с нарушением CP -четности. Дальнейшее развитие теория ЭДМ частиц с полужелым спином находит в гл. 7–11 настоящей книги. В работах

[11, 36, 12] предсказано существование парамагнетизма свободных электронов. Общая теория изменения массы покоя частиц во внешнем электромагнитном поле была предложена в [38, 39]. В работе [40] приведены формулы, позволяющие рассчитывать массу покоя частицы, захваченной ядром атома.

Квантовая механика воспринимается обычно как наука, описывающая явления, проистекающие в микромире (согласно сегодняшней терминологии более точным является термин «наномир» и т. д.) Однако экспериментальные данные, накопленные в последние десятилетия, свидетельствуют о том, что явления, проистекающие в космологических масштабах, также требуют привлечения методов волновой механики материального поля. В первую очередь здесь речь идет о теории «зеркальных» частиц. Как мы увидим, именно отсутствие последовательной теории зеркальных частиц привело к появлению таких эмоционально окрашенных терминов, как «темная материя», «черные дыры» и т. п. Теории зеркальных частиц посвящены гл. 5 и 9 настоящей книги.

Теории квартионов, как составляющих структуры частиц, посвящены гл. 8 и 11 книги.

Значительно большее внимание, чем это делается в стандартных курсах квантовой механики, мы уделим теории взаимодействия атомов с электромагнитным полем. Рассмотрению этих вопросов посвящены гл. 6, 13 и 14.

1.1. Волновая функция

Итак, основополагающим понятием в рамках волновой механики является понятие волновой функции. Физический смысл волновой функции уравнения Шредингера, исторически первого уравнения волновой квантовой механики, был долгое время предметом активного и всестороннего обсуждения. По прошествии некоторого исторического этапа развития квантовой механики доминирующей стала копенгагенская интерпретация, состоящая в том, что квадрат модуля волновой функции

$$p(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (1.1)$$

определяет плотность вероятности p нахождения частицы в пространственной точке \mathbf{r} в момент времени t . Эта интерпретация смысла волновой функции непосредственно следует из свойств нерелятивистского уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.2)$$

и имеет приведенное ниже математическое основание. Уравнение непрерывности, вытекающее из уравнения (1.2), имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (1.3)$$

где компоненты 4-вектора плотности потока материального поля имеют вид

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m_0} (\nabla\psi^* \cdot \psi - \psi^* \cdot \nabla\psi). \quad (1.4)$$

Интегрируя (1.3) по бесконечному объему и используя следующее граничное условие:

$$\oint_{S(r \rightarrow \infty)} \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0, \quad (1.5)$$

получаем

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \text{const.} \quad (1.6)$$

Полагая константу равной единице:

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1, \quad (1.7)$$

мы получаем соответствие с определением (1.1), поскольку вероятность нахождения частицы в какой-либо точке бесконечного трехмерного объема равна единице в любой момент времени, а интеграл в левой части (1.7) в соответствии с (1.1) как раз и определяет эту вероятность. Уравнение (1.7) задает условие нормировки волновых функций дискретного спектра в рамках нерелятивистской теории частиц.

Физическим величинам в квантовой механике ставятся в соответствие операторы \hat{F} . Операторы осуществляют те или иные преобразования волновой функции. Общее определение операторов и их систематику мы обсудим позже. Например, применительно к уравнению Шредингера, указанное соответствие оператора и физической величины состоит в том, что измеряемое значение физической величины в состоянии, описываемом волновой функцией ψ , определяется величиной интеграла

$$\langle \hat{F} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{F} \psi(\mathbf{r}, t) dV. \quad (1.8)$$

Из (1.8) следует, что измеряемое значение физической величины определяется квантово-механическим средним. Измеряемые значения физических величин должны быть действительными, поэтому операторы должны быть самосопряженными:

$$\hat{F} = \hat{F}^+, \quad (1.9)$$

где оператор \hat{F}^+ , сопряженный линейному оператору \hat{F} , определяется согласно правилу

$$\int \varphi^* \cdot \hat{F} \psi dV = \int \hat{F}^+ \varphi^* \cdot \psi dV. \quad (1.10)$$

В (1.10) принято обозначение, согласно которому оператор действует на волновую функцию, стоящую по одну с ним сторону от точки.

Уравнение (1.7) является наглядной иллюстрацией вероятностной интерпретации квантовой механики. Однако в общем случае оно нуждается в целом ряде обобщений.

Во-первых, скалярная волновая функция описывает состояние частицы, не имеющей внутренних степеней свободы. Волновые функции частиц, имеющих внутренние степени свободы, являются многокомпонентными. Для скалярных волновых функций условие нормировки (1.7) однозначно определяет состояние частицы. Например, если частица совершает одномерное движение между двумя абсолютно непроницаемыми стенками, расположенными на расстоянии L друг от друга, то собственные волновые функции имеют вид

$$\psi_n(x) = C_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right).$$

Условие нормировки (1.7) позволяет определить модуль нормировочных коэффициентов: $|C_n| = \sqrt{2/L}$. В общем случае эти коэффициенты могут иметь произвольные фазовые множители: $C_n = |C_n| \exp(i\varphi_n)$. Однако постоянные фазовые множители не влияют как на значение вероятности нахождения частицы в данной точке пространства, так и на значения наблюдаемых величин (1.8), поэтому условие нормировки (1.7) однозначно задает состояние частиц, описываемых скалярными волновыми функциями.

Пусть теперь волновая функция уравнения (1.2) является двухкомпонентной, тогда собственные волновые функции задачи об одномерном движении частицы между двумя абсолютно непроницаемыми стенками имеют вид

$$\psi_n(x) = \left(A_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + B_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right).$$

Нормировочные коэффициенты A_n и B_n являются в общем случае комплексными, поэтому для однозначного задания состояния частицы мы должны определить четыре действительные константы. Удобно ввести понятие нормы волновой функции: $N(\mathbf{r}, t) = \psi_n^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_n(\mathbf{r}, t)$. В случае волновых уравнений с первой производной по времени норма волновой функции совпадает с временной компонентой 4-вектора плотности потока материального поля даже в случае многокомпонентных волновых функций¹⁾, т. е. $N(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)$, поэтому условие нормировки волновых функций (1.7), имеющее теперь вид

$$\int \psi_n^\dagger(x) \psi_n(x) dx = \frac{L}{2} (|A_n|^2 + |B_n|^2) = 1, \quad (1.11)$$

¹⁾ В случае волновых уравнений со второй производной по времени норма волновой функции отличается от временной компоненты 4-вектора плотности потока. Как мы увидим позже, в случае спинорных полей норма является компонентой отдельного 4-вектора.

позволяет определить лишь одну действительную константу. Следовательно, величины нормы многокомпонентной волновой функции не достаточно для однозначного задания состояния частицы.

В пространстве двухкомпонентных волновых функций мы можем ввести четыре линейно независимых оператора, являющихся (2×2) -матрицами:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

поэтому наряду с нормой волновой функции состояние частицы должно определяться значением следующей векторной величины:

$$\mathbf{m} = \mu_0 \int \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi dV. \quad (1.12)$$

Отметим, что ρ и \mathbf{j} , определяемые равенствами (1.4), являются компонентами 4-вектора потока материального поля, обусловленного трансляционным движением частицы как целого. В случае частицы, описываемой скалярной волновой функцией, трансляционные степени свободы являются единственными степенями свободы движения частицы и поэтому компоненты 4-вектора плотности тока определяются выражениями

$$\rho_e(\mathbf{r}, t) = q_0 \rho(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t) = q_0 \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \quad (1.13)$$

Как видно из (1.4) и (1.13), плотность тока скалярной частицы является плотностью электрического тока и зависит от величины ее заряда q_0 и массы m_0 .

В случае частицы, описываемой многокомпонентной волновой функцией, поле отклика будет зависеть также и от характера ее внутреннего движения, т. е. от функции $\mu_0 \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi$, являющейся плотностью распределения вероятности величины \mathbf{m} , определяемой (1.12). Из общих соображений ясно, что эволюция частицы по внутренним степеням свободы может отличаться от трансляционного движения, поэтому априори не очевидно, что коэффициент μ_0 в (1.12) должен быть непосредственно, с помощью тех или иных соотношений, связан с зарядом и массой частицы.

Во-вторых, условие нормировки (1.7) выполняется лишь для волновых функций связанных состояний, имеющих дискретный спектр энергетических уровней. В этом случае граничное условие (1.5) выполняется за счет того, что волновая функция обращается в нуль на бесконечности: $\psi(\mathbf{r}, t)|_{r \rightarrow \infty} = 0$. Волновые функции состояний непрерывного спектра могут быть конечны при $r \rightarrow \infty$. В этом случае волновая функция должна прежде всего удовлетворять граничному условию (1.5), которое нормирует поток рассеянных частиц на поток падающих. Учитывая (1.13), мы видим, что условие (1.5) эквивалентно

условию сохранения заряда частицы (1.7), поскольку, интегрируя уравнение непрерывности (1.3) по бесконечно большому объему, получаем

$$\frac{d}{dt} \int \rho dV = - \oint \mathbf{j} d\mathbf{S},$$

где интегрирование в правой части производится по бесконечно удаленной поверхности. Следовательно, при выполнении (1.5) получаем: $\int |\psi|^2 dV = \text{const}$. Состояния непрерывного спектра неизбежно возникают в задачах рассеяния частиц во внешних полях и задачах ионизации атома, поэтому условие (1.5) в этом случае эквивалентно условию сохранения суммарного заряда (1.7), т.е. если в процессе рассеяния частицы рождаются частицы противоположного заряда, то суммарный заряд всех частиц остается при этом равным заряду налетающей частицы. Если плотность электрического заряда определяется соотношением (1.13), то это означает, что плотность распределения вероятности для появившейся в результате акта рассеяния частицы, имеющей заряд противоположного знака по отношению к падающей, является отрицательной. Такая интерпретация неизбежно выводит нас за рамки традиционной вероятностной интерпретации волновой функции, однако она находится в соответствии с фундаментальным законом сохранения заряда. При этом для низкоэнергетических процессов рассеяния, т.е. процессов, при которых рождения новых частиц не происходит, вероятностная интерпретация сохраняется.

В-третьих, как мы отмечали выше, последовательным принципом вывода волновых уравнений является принцип действия. Полагается, что действие должно быть действительным. Выражение для действия можно записать в виде

$$S = \int \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \widehat{S} \psi(\mathbf{r}, t) dV dt.$$

Поскольку действие должно быть действительной величиной, то оператор действия должен быть самосопряженным оператором: $\widehat{S}^\dagger = \widehat{S}$, а следовательно сопряженная волновая функция ψ^\dagger должна выбираться в таком виде, чтобы удовлетворить указанному условию. В случае многокомпонентной волновой функции оператор действия зависит от матриц, осуществляющих унитарные преобразования многокомпонентной волновой функции, поэтому сопряженная волновая функция имеет в общем случае вид: $\psi^\dagger = \psi^+ M$, где ψ^+ — эрмитово-сопряженная волновая функция, а M — произвольная унитарная матрица. Несложно видеть, что в случае многокомпонентной волновой функции норма волновой функции

$$N(\mathbf{r}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)$$

не является заведомо положительно определенной. Произведение $\psi^\dagger \psi = \psi^+ M \psi$ является заведомо положительно определенной величиной

только в том случае, когда матрица M является единичной. Во всех остальных случаях указанное произведение может иметь произвольный знак, поскольку условие действительности $\psi^\dagger\psi$ накладывает лишь ограничение, состоящее в том, что матрица M должна быть эрмитовой.

В-четвертых, условие нормировки имеет различный вид в релятивистской и нерелятивистской теории. Действительно, в нерелятивистском случае вероятность нахождения частицы в объеме V в момент времени t определяется интегралом $p(t) = \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$. Разность вероятностей нахождения частицы в объеме V в моменты t и $t + \Delta t$ пропорциональна потоку вероятности $\oint_S \mathbf{j} d\mathbf{S}$ через поверхность S , ограничивающую объем V . Если стенки, ограничивающие объем V , являются непроницаемыми для частицы, то

$$p(t + \Delta t) - p(t)|_{\Delta t \rightarrow 0} = \frac{d}{dt} \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 0.$$

Отсюда и следуют условия нормировки (1.7) и (1.5) для состояний дискретного и непрерывного спектров соответственно. В нерелятивистском случае вероятность нахождения частицы в объеме V одинакова для всех инерциальных наблюдателей, поскольку величина объема инвариантна относительно преобразований Галилея. В релятивистском случае инвариантной относительно преобразований Лоренца является величина 4-объема $d\Omega = c dt dV$, поэтому объемы в моменты времени t и $t + \Delta t$ являются двумя различными гиперплоскостями: $S_4(t) = V(t)$ и $S_4(t + \Delta t) = V(t + \Delta t)$, перпендикулярными оси x_4 в четырехмерном пространстве. Релятивистски инвариантное выражение для вероятности нахождения частицы в объеме V в момент времени t имеет вид интеграла $\int j_\mu dS_\mu$ по гиперплоскости $S_4(t)$, где j_μ — 4-вектор плотности потока вероятности, пространственными компонентами которого являются плотность потока вероятности \mathbf{j} , а временной компонентой является $c\rho$. Разность вероятностей нахождения частицы в объеме V в моменты времени t и $t + \Delta t$ определяется выражением

$$p(t + \Delta t) - p(t) = \int_{V(t+\Delta t)} j_\mu dS_\mu - \int_{V(t)} j_\mu dS_\mu.$$

Полагая, в частности, что интегрирование ведется по всей гиперплоскости $t = \text{const}$, т. е. по всему трехмерному объему, и интеграл по боковой поверхности $c\Delta t$ равен нулю, получаем

$$p(t + \Delta t) - p(t) = \oint_{\Delta\Omega} j_\mu dS_\mu = \int_{\Delta\Omega} \frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} d\Omega = 0,$$

что находится в соответствии с уравнением непрерывности (1.3), имеющим одинаковый вид для любых уравнений, удовлетворяющих указанным выше принципам. Учитывая, что $\Delta\Omega = c(t + \Delta t)V(t + \Delta t) - ctV(t)$, и устремляя $\Delta t \rightarrow 0$, несложно видеть, что при релятивистски инвариантном определении вероятности временная компонента плотности потока j_4 будет с необходимостью включать временные производные от волновой функции.

Таким образом, мы видим, что вероятностная интерпретация волновых свойств микрочастиц, основанная на наглядных соотношениях (1.7)–(1.8), может быть обобщена и существенно расширена. В результате таких обобщений физические принципы, лежащие в основе выражений (1.7)–(1.8), не меняя своей сути, принимают новую математическую форму, которая может существенно отличаться от исходной — нерелятивистской. Естественно, что последовательное самосогласованное развитие теории должно базироваться на едином формализме, который в рамках единой процедуры позволял бы получать, как исходные соотношения, так и их обобщения. В качестве такой последовательной самосогласованной процедуры в настоящее время выступает формализм, основанный на применении функции Лагранжа и преобразований симметрии. Формализм функции Лагранжа дает возможность последовательного изменения (или обобщения) уравнений путем введения в нее дополнительных членов. При этом вводимые новые слагаемые должны согласовываться с общими требованиями, предъявляемыми к функции Лагранжа. В свою очередь основу для конструирования действия дают симметричные к преобразованиям Лоренца свойства волновых функций, отвечающих той или иной размерности пространства внутренних степеней свободы частицы, поскольку операторы основных физических величин являются генераторами соответствующих преобразований.

1.2. Принцип действия

Принцип наименьшего действия лежит в основе наиболее последовательной и математически строгой процедуры получения уравнений классической механики. Этот принцип, с одной стороны, имеет вполне ясную физическую интерпретацию, состоящую в том, что произвольная система частиц, взаимодействующих друг с другом и имеющих возможность тем или иным способом обмениваться энергией с окружением, стремится прийти в состояние с минимальной энергией. Отметим, например, что система заряженных частиц может обмениваться энергией с электромагнитным полем, поскольку энергия создаваемого частицами электромагнитного поля зависит от взаимного расположения частиц и скоростей их движения. С другой стороны, простая физическая идея нашла изящное математическое воплощение, которое дает нам общий алгоритм построения теории взаимодействующих частиц. Неудивительно поэтому, что указанный принцип,

сформулированный изначально для системы точечных частиц, был обобщен вскоре и применительно к задачам волновой оптики, что и показало наличие общности между волновыми и корпускулярными явлениями.

Первоначальные уравнения квантовой механики, естественно, не базировались на использовании принципа действия (так же, впрочем, как это было и в случае уравнений классической механики), а основывались на интуитивных соображениях. Действительно, как мы уже отмечали в предисловии, согласно С. Вайнбергу и П. А. М. Дираку, Э. Шредингер сначала исследовал релятивистское уравнение, которое теперь называется уравнением Клейна–Гордона–Фока, однако затем отказался от него и предложил уравнение, носящее в настоящее время его имя.

Принцип действия базируется на следующих положениях. Волновые поля характеризуются своими амплитудами во всех точках пространства во все моменты времени, поэтому они эквивалентны механическим системам с бесконечным числом степеней свободы. Волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ выступает в этом случае в качестве координаты поля. Подобно тому как функция Лагранжа точечной частицы $L(q, \dot{q})$ зависит от ее координат и скоростей, функция Лагранжа волнового поля зависит от волновой функции частицы и ее первых пространственно-временных производных:

$$L(\psi, \dot{\psi}, \nabla\psi),$$

где $\dot{\psi} = \partial\psi/\partial t$. В отличие от функции Лагранжа, вводимой в классической механике точечной частицы, в полевой теории используется локальная функция Лагранжа, или плотность лагранжиана ($L = \int L dV$), поэтому появление пространственных производных в функции Лагранжа вполне понятно.

Функция Лагранжа удовлетворяет ряду общих свойств. Обычно считают, что функция Лагранжа является действительной, не зависит явно от пространственно-временных координат и инвариантна относительно преобразования координат. В нерелятивистском случае функция Лагранжа должна быть инвариантна относительно преобразований Галилея, в релятивистском случае — относительно преобразований Лоренца. Вполне понятно, что самосогласованная теория частиц, взаимодействующих с электромагнитным полем, должна отражать свойство калибровочной инвариантности, поскольку электромагнитное поле обладает этим свойством.

Уравнения, которым удовлетворяют волновые функции частиц, следуют из принципа наименьшего действия. Вариация действия

$$S = \int \int L(\psi, \dot{\psi}, \nabla\psi) dV dt \quad (1.14)$$

по амплитудам полей должна быть равна нулю:

$$\delta S = \int \int \left[\frac{\partial L}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial L}{\partial \psi_i} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} \right) \right] \delta \psi dV dt = 0, \quad (1.15)$$

где $\psi_i = \partial \psi / \partial x_i$. Поскольку вариация $\delta \psi$ произвольна, то уравнение (1.15) эквивалентно следующему дифференциальному уравнению Лагранжа–Эйлера:

$$\frac{\partial L}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial L}{\partial (\partial \psi / \partial x_i)} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial (\partial \psi / \partial t)} \right) = 0. \quad (1.16)$$

Импульс, канонически сопряженный координате ψ , определяется выражением

$$\pi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}.$$

Используя это определение, мы можем ввести функцию Гамильтона

$$H = \pi \dot{\psi} - L, \quad (1.17)$$

которая позволяет получить уравнения Гамильтона для поля:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{\partial H}{\partial \pi} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial H}{\partial (\partial \pi / \partial x_i)} \right), \\ \frac{\partial \pi}{\partial t} &= - \left[\frac{\partial H}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial H}{\partial (\partial \psi / \partial x_i)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Функция Гамильтона имеет размерность плотности энергии поля, а пространственный интеграл от нее, $\int H dV$, имеет размерность энергии. Если этот интеграл привести к виду $\int H dV = \int \psi^* (\mathbf{r}, t) \hat{H} \psi (\mathbf{r}, t) dV$, то \hat{H} принимает вид дифференциального оператора, который называется гамильтонианом и играет центральную роль в нерелятивистской квантовой механике.

Пользуясь физическим смыслом функции Гамильтона, мы можем конструировать ее исходя из аналогии с уравнениями классической физики. Однако более существенным является тот факт, что появляется априорная информация о возможной структуре функции Гамильтона (а следовательно, и функции Лагранжа). Действительно, энергия замкнутой системы частиц не должна изменяться при пространственной трансляции и пространственных вращениях всей системы частиц как целого, поскольку свободное пространство однородно. Следовательно, функция Гамильтона свободной частицы должна быть квадратичной формой $\nabla \psi$. В отличие от пространственных координат, ось времени имеет одно направление, поэтому симметрия уравнений относительно изменения направления времени представляет, казалось бы, чисто математический интерес. Однако при изменении знака времени скорость

частицы меняется на противоположную, поэтому указанную симметрию можно связать с наличием или отсутствием симметрии прямого и обратного движения частицы. Несложно догадаться, что если волновая функция частицы является действительной, то указанная симметрия может быть присуща только уравнениям, базирующимся на действии, являющемся квадратичной формой производной $\partial\psi/\partial t$. В случае частиц, описываемых комплексными волновыми функциями, появляется дополнительная степень свободы, связанная с переходом к комплексно сопряженной волновой функции.

В случае когда волновая функция является комплексной,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + i\psi_2(\mathbf{r}, t),$$

функция Лагранжа становится функцией двух действительных волновых полей. В качестве координат поля в этом случае мы можем рассматривать как действительную и мнимую части волновой функции, так и функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ и $\psi^*(\mathbf{r}, t)$:

$$L(\psi, \dot{\psi}, \nabla\psi, \psi^*, \dot{\psi}^*, \nabla\psi^*).$$

Поэтому вариацию действия можно проводить по координатам полей ψ и ψ^* . Нетрудно видеть, что в случае комплексных волновых полей симметрия относительно замены $t \rightarrow -t$ позволяет включить в выражение для действия слагаемое вида $i\psi^*(\partial\psi/\partial t)$, которое, как несложно видеть, является самосопряженным и сохраняет указанную симметрию при одновременном изменении знака времени и переходе к уравнению для комплексно сопряженной волновой функции.

Формализм функции Лагранжа был разработан для анализа задач классической механики. Первой полевой теорией, основанной на каноническом лагранжевом формализме, была теория электромагнитного поля. Электромагнитное поле является векторным, поэтому ясно, что волновая функция частицы может быть не только действительной или комплексной скалярной функцией, но и многокомпонентной. Преобразования волновых функций при преобразовании координат различны для скалярных и многокомпонентных волновых функций. Представление группы преобразований образует базовый набор операторов, действующих в пространстве волновых функций той или иной размерности.

Как мы уже отмечали выше, обычно полагается, что функция Лагранжа зависит от волновой функции и ее производных не выше первого порядка. С другой стороны, требование линейности и однородности уравнений свободных полей приводит к тому, что функция Лагранжа может быть лишь квадратичной формой волновой функции и ее производных. Указанные два требования, с учетом трансформационных свойств и условия действительности действия, практически полностью определяют вид функции Лагранжа свободного поля для волновой функции произвольной размерности. Остается лишь свобода в выборе коэффициентов квадратичной формы. Однако возможный выбор коэф-

фициентов также невелик, поскольку он определяется требованиями размерности и физического смысла. Поэтому применение лагранжева формализма к теории свободных материальных полей представляет интерес лишь с точки зрения введения базовых понятий и принципов, являющихся необходимым звеном в развитии последовательной теории взаимодействующих частиц.

Отметим, что информацию о свойствах частиц мы получаем лишь из изучения их взаимодействий. Однако пертурбативные теории, в которых энергия взаимодействия частиц полагается малой по сравнению с энергией покоя каждой из них, неизбежно рассматривают взаимодействия частиц с позиций их свойств, задаваемых теориями свободных частиц, и не учитывают изменения симметричных свойств частиц под влиянием полей, осуществляющих взаимодействие. Такой подход применим лишь в низкоэнергетической области, когда энергия взаимодействия мала по сравнению с энергией покоя каждой из них. Последовательная теория частиц должна учитывать симметричные свойства полной системы (включающей как частицы, так и поля, посредством которых осуществляется взаимодействие частиц), т.е. рассматривать взаимодействия частиц непertурбативным образом.

Один из наглядных примеров различия свойств свободных и взаимодействующих частиц состоит, например, в том, что, как мы уже отмечали, 4-вектор тока пропорционален 4-вектору потока материального поля (см. (1.4) и (1.13)) лишь для частиц, описываемых скалярными волновыми функциями. Для частиц, описываемых многокомпонентными волновыми функциями, 4-вектор тока отличается от 4-вектора потока материального поля, связанного с трансляционным движением частицы. Эти отличия вполне предсказуемы и с точки зрения законов классической механики и электродинамики. Действительно, теоремы классической механики свидетельствуют о том, что если в процессе взаимодействия тел не затрагиваются их внутренние степени свободы, то для описания взаимодействия тел мы можем использовать модель точечных частиц, где в качестве материальных параметров выступают лишь их массы и заряды. Однако если взаимодействие тел является нецентральным, то это приводит к изменению энергии их внутреннего движения, поэтому конечные состояния взаимодействующих тел начинают зависеть от их формы. В классической механике в качестве параметра, характеризующего форму частиц, выступает момент инерции. В случае заряженных частиц дополнительно должны учитываться моменты распределения заряда и тока взаимодействующих тел. Частица, описываемая скалярной волновой функцией, не имеет внутренних степеней свободы, и поэтому она не может иметь ни собственного углового момента, ни моментов распределения заряда и тока. Поведение такой частицы во внешнем электромагнитном поле определяется лишь ее зарядом и массой. Напротив, поведение во внешнем электромагнитном поле частицы, описываемой многокомпонентной волновой функцией, не может зависеть только от ее массы и заряда, поскольку

она может совершать и внутреннее движение, которое должно характеризоваться либо величиной собственного углового момента частицы, либо моментами распределения заряда и тока. Действительно, любое движение частицы связано с координатной зависимостью фазы ее волновой функции. Многокомпонентная волновая функция является гиперкомплексной функцией, поэтому координатные зависимости фаз различных компонент могут различаться. Следовательно, выделяя общий фазовый множитель, мы тем не менее оставляем возможность совершения частицей внутреннего движения. Поскольку норма волновой функции не зависит от фазовых множителей компонент, то внутреннее движение не приводит к изменению плотности распределения вероятности $\psi^\dagger\psi$. Однако ее внутреннее состояние зависит от начальных условий. Например, как мы показали выше, для частицы, описываемой двухкомпонентной волновой функцией, внутреннее состояние определяется значением вектора \mathbf{m} . Из общих соображений ясно, что энергия взаимодействия частицы с внешними векторными полями будет различна для частиц с различными значениями \mathbf{m} . Следовательно, плотность тока может и должна отличаться от плотности потока материального поля, что имеет принципиальное значение для теории взаимодействующих частиц.

1.3. Преобразования симметрии

Исследование симметричных свойств математических уравнений, используемых нами для моделирования процессов, происходящих в окружающем мире, имеет существенное значение, поскольку позволяет, даже не зная точного решения уравнений, определить закономерности, которым подчиняются начальные и конечные состояния частиц, описываемых соответствующими уравнениями. В свою очередь знание экспериментально наблюдаемых зависимостей позволяет нам так или иначе изменять исходные уравнения, с тем чтобы удовлетворить наблюдаемым закономерностям. Учитывая вышесказанное, преобразования симметрии можно разделить на два класса. Во-первых, это фундаментальные симметрии, например симметрии преобразований Лоренца, если мы считаем, что уравнения квантовой механики должны подчиняться им. Во-вторых, это симметрии уравнений, которые получаются обобщением уравнений свободной частицы с помощью канонической подстановки $p_\mu \rightarrow p_\mu - q_0 A_\mu/c$.

Преобразования симметрии выделяют такой класс преобразований волновых функций при ортогональных преобразованиях координат, которые оставляют неизменными результаты наблюдений. Исследование операций симметрии представляет интерес прежде всего потому, что операторы основных физических величин являются генераторами преобразований симметрии. Основные свойства операторов проявляются в их коммутационных соотношениях. Особый интерес представляют операторы, отвечающие сохраняющимся величинам, т.е. операторы,

коммутирующие с гамильтонианом. Поэтому изучение преобразований симметрии и коммутационных свойств операторов дает нам основу для конструирования действия свободной частицы или системы взаимодействующих частиц.

Выше мы обсуждали ряд преобразований симметрии, которые оставляют неизменной полную энергию системы частиц. В нерелятивистском случае к таким преобразованиям, например, относятся пространственно-временные сдвиги и пространственные вращения. При этом операции, производимые над волновой функцией, можно выполнять двумя путями: либо изменять координаты частиц в фиксированной системе координат, либо же менять положение координатных осей при фиксированном положении частиц. Два указанных преобразования являются взаимно обратными. Действительно, пространственный сдвиг всех частиц замкнутой системы на вектор $\Delta \mathbf{r}$ приводит к тому, что координаты частиц становятся равными: $\mathbf{r}'_a = \mathbf{r}_a + \Delta \mathbf{r}$. Такие же значения координат будут у частиц в системе отсчета, сдвинутой на вектор $-\Delta \mathbf{r}$ при неизменном положении частиц в пространстве.

Тем не менее эти два преобразования не являются полностью эквивалентными. Действительно, уравнения для частицы, находящейся во внешнем поле, в общем случае не обладают трансляционной инвариантностью, поскольку в этом случае мы сдвигаем только саму частицу и не меняем положения частиц, создающих эти поля. Преобразования системы координат подразумевают изменение координат как рассматриваемой частицы, так и частиц, создающих эти поля. Трансляционной инвариантностью обладает лишь гамильтониан замкнутой системы, полагая же наличие неподвижных внешних тел, действующих на рассматриваемую частицу, мы делаем систему незамкнутой.

Второе отличие состоит в том, что полная система уравнений для ансамбля взаимодействующих частиц, помимо уравнений для самих частиц, включает и уравнения для полей, посредством которых эти частицы взаимодействуют. Симметрия же уравнений, например для электромагнитного поля, может отличаться от симметрии материальных волновых уравнений для частиц. Естественно поэтому, что симметрия уравнений для свободной частицы может существенно отличаться от симметрии уравнений для системы взаимодействующих частиц.

Можно сказать, что операции над частицей позволяют выяснить симметричные свойства уравнений, описывающих движение частицы во внешних полях, а преобразования координат позволяют выяснить симметрию взаимодействий частиц. Обе указанные симметрии, несомненно, представляют интерес для анализа физических задач. Однако большей общностью обладает подход, основанный на преобразовании системы координат. Хотя бы потому что в этом случае мы можем рассмотреть единым образом как ансамбль, содержащий несколько разных частиц, так и одну точечную частицу, расположенную в начале координатных осей.

В дальнейшем мы будем обращаться к обоим подходам, однако анализируя уравнения движения частицы во внешнем электромагнитном поле, мы будем вначале полагать, что источники поля являются макроскопическими телами, координаты которых остаются неизменными при преобразованиях координат рассматриваемой частицы. Симметричные свойства замкнутой системы частиц, взаимодействующих посредством электромагнитного поля, будут исследованы позже, когда лагранжев формализм начнет применяться для развития теории атомных спектров.

Глава 2

ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИММЕТРИИ В НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ ТЕОРИИ

Изменения системы отсчета приводят к изменению вида волновой функции. Под преобразованиями симметрии понимаются такие преобразования системы отсчета, которые не приводят к изменению вероятности исходов возможных событий, т. е. не зависят от того, какую систему отсчета мы используем для наблюдения за явлениями. Преобразования системы отсчета отличаются в релятивистском и нерелятивистском случаях, а преобразования волновой функции различны для скалярных и векторных полей. Цель книги не состоит в развитии общей теории полей для волновых функций произвольной размерности. Основным объектом нашего интереса являются скалярные и спинорные материальные поля. Настоящая глава посвящена преобразованиям симметрии в нерелятивистском случае, релятивистский случай будет рассмотрен в следующей главе.

2.1. Ортогональные преобразования координат

Ортогональными преобразованиями координат в нерелятивистском случае являются преобразования Галилея

$$x'_i = a_{ij}x_j + b_i, \quad t' = t, \quad (2.1)$$

где матрица преобразования a_{ij} обладает следующим свойством:

$$a_{ij}a_{ik} = \delta_{jk}. \quad (2.2)$$

В формулах (2.1) и (2.2) и всюду далее мы полагаем, что по повторяющемуся индексу производится суммирование. Преобразования (2.1) включают пространственный сдвиг b_i , трехмерные вращения и пространственную инверсию. Например, матрица вращения системы координат на угол θ вокруг оси z имеет вид

$$a_R = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Матрица преобразования пространственной инверсии имеет вид

$$a_P = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Преобразования (2.1) можно дополнить преобразованиями временного сдвига

$$t' = t + \Delta t \quad (2.5)$$

и обращения времени

$$t' = -t. \quad (2.6)$$

Преобразования (2.1) включают в себя тождественное преобразование

$$a_{ij} = \delta_{ij}, \quad b_i = 0. \quad (2.7)$$

Преобразования, получающиеся из тождественного путем непрерывного изменения параметров, например угла поворота θ , пространственного $\Delta \mathbf{r}$ и временного Δt сдвигов, называются непрерывными. Преобразования пространственной (2.4) и временной (2.6) инверсии являются дискретными преобразованиями. Отметим, что преобразование пространственной инверсии является произведением трех преобразований отражения пространственных осей.

Взяв детерминант от обеих частей уравнения (2.2), получаем

$$\text{Det}^2(a) = 1.$$

Следовательно,

$$\text{Det}(a) = \pm 1. \quad (2.8)$$

Детерминант произвольного числа произведений матриц вращений равен единице. Равен единице также и детерминант четного числа произведений матриц отражения пространственных осей, поскольку они сводятся к поворотам. Детерминант нечетного числа отражений пространственных осей равен минус единице. Преобразования с $\text{Det}(a) = +1$ составляют подгруппу полной группы однородных ($b_i = 0$, $\Delta t = 0$) или неоднородных ($b_i \neq 0$, $\Delta t \neq 0$) ортогональных преобразований координатных осей.

При преобразованиях координат (2.1)–(2.6) волновая функция принимает вид $\psi'(\mathbf{r}', t')$. В случае когда волновая функция является скалярной, ее изменения связаны лишь с изменением аргументов, т. е. координат и времени. Если же волновая функция является многокомпонентной, то изменения волновой функции связаны как с изменением аргументов ее компонент, так и с изменением формы волновой функции, т. е. взаимными преобразованиями ее компонент. Таким образом, в соответствие преобразованию координат (2.1) мы можем поставить преобразование волновой функции:

$$\psi'(\mathbf{r}', t') = W(a, b)\psi(\mathbf{r}, t).$$

Преобразования координат означают изменение системы отсчета, в которой мы наблюдаем явления. Под преобразованиями симметрии понимаются такие изменения системы отсчета, которые не приводят к изменению вероятности результатов исходов. Отметим, что численные значения наблюдаемых величин при этом могут меняться. Дей-

ствительно, скорость частицы, находящейся между двумя абсолютно непроницаемыми движущимися стенками, будет различна в неподвижной системе координат и системе координат, движущейся вместе со стенками. Однако вероятность нахождения частицы в определенной точке пространства между стенками должна быть одинакова в обеих системах отсчета. Должен быть одинаковым также и результат произвольного внешнего воздействия на эту частицу.

В рамках преобразования Галилея временная координата является выделенной. Эквивалентность пространственных координат и времени возникает лишь в рамках преобразований Лоренца, которые наряду с трехмерными вращениями включают также и четырехмерные, связывающие пространственные координаты и время. Отметим, однако, что, оставаясь в рамках преобразований Галилея (2.1), мы можем дополнить эти преобразования преобразованием (2.5), положив, что b наряду с пространственным сдвигом включает также и временной сдвиг.

Для того чтобы оператор $W(a, b)$, осуществляющий преобразование волновой функции, однозначно соответствовал заданному преобразованию координат, он должен обладать рядом общих свойств. Во-первых, оператор тождественного преобразования должен быть единичным оператором: $W = I$. Во-вторых, оператор $W(a, b)$, отвечающий непрерывному преобразованию координат, должен быть непрерывной функцией параметров преобразования, следовательно, бесконечно малому изменению параметров δa и δb должно соответствовать бесконечно малое изменение волновой функции: $\psi' = (I + \delta W)\psi$, где $\delta W \rightarrow 0$ при $\delta a \rightarrow 0$ и $\delta b \rightarrow 0$. В-третьих, оператор W должен удовлетворять правилу композиции: $W(a', b')W(a, b) = W(a'a, a'b + b')$, т. е. оператор W , соответствующий двум последовательным преобразованиям координат, должен быть произведением операторов, соответствующих каждому из преобразований координат. Набор операторов W , удовлетворяющих указанным требованиям, осуществляет представление группы ортогональных преобразований координат.

В случае когда компоненты поля являются наблюдаемыми и, следовательно, действительными величинами, как, например, в случае электромагнитного поля, оператор преобразования W , удовлетворяющий указанным выше требованиям, однозначно определяется параметрами преобразования, по крайней мере в окрестности $a_{ij} \rightarrow 0$ и $b_i \rightarrow 0$. Однако в теории материальных полей, использующих гиперкомплексные волновые функции, наблюдаемой величиной является не волновая функция, а ее билинейные комбинации, поэтому условия однозначной связи преобразования координат и преобразования волновой функции не являются обязательными. Тем не менее оператор преобразования волновой функции должен быть таким, чтобы наблюдаемые величины преобразовывались вполне однозначно. Например, калибровочное преобразование скалярной комплексной волновой функции $\psi' \rightarrow \psi \exp(i\alpha)$ оставляет инвариантной билинейную комбинацию $\psi^*\psi$.

Указанные выше требования приводят к тому, что представления группы ортогональных преобразований координат разбиваются на два класса: однозначные $(a, b) \rightarrow W(a, b)$ и двузначные $(a, b) \rightarrow \pm W(a, b)$. Первые называются тензорными или псевдотензорными (т. е. меняющими знак при операции пространственной инверсии) преобразованиями, вторые — спинорными. Тензорные преобразования соответствуют волновым полям частиц с целым спином, а спинорные преобразования — волновым полям частиц с полуцелым спином.

2.2. Скалярные поля

В общем случае оператор $W(a, b)$ удобно представить в виде произведения двух операторов: $W(a, b) = U(a)T(a, b)$, где оператор $T(a, b)$ осуществляет преобразование аргументов волновой функции, а оператор $U(a)$ осуществляет преобразование формы. Порядок операторов в этом произведении несуществен, поскольку они действуют на разные степени свободы частицы, а потому являются коммутирующими. Ввиду непрерывности оператора $W(a, b)$ свойства его элементов могут быть определены из преобразований, бесконечно близких к тождественному. В случае скалярного поля оператор такого преобразования может быть записан в виде

$$T(a, b) = I + i\varepsilon L,$$

где ε — матрица, элементы которой являются бесконечно малыми действительными числами. Условие сохранения нормы волновой функции требует, чтобы операторы L были самосопряженными операторами:

$$L^+ = L.$$

Следовательно, операторы L могут соответствовать наблюдаемым величинам.

2.2.1. Пространственно-временные трансляции. Как мы отмечали выше, операция параллельного переноса всех частиц в замкнутой системе на бесконечно малый вектор $\delta\mathbf{r}$ эквивалентна смещению системы координат на вектор $-\delta\mathbf{r}$. Волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ при таком преобразовании принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1 - \delta\mathbf{r}, \mathbf{r}_2 - \delta\mathbf{r}, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) - \delta\mathbf{r} \sum_a \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{r}_a} = \\ &= \left(1 - i\delta\mathbf{r} \sum_a (-i\nabla_a) \right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Поскольку параллельный перенос всех частиц замкнутой системы не меняет ее энергии, то оператор смещения $\sum_a (-i\nabla_a)$ коммутирует с гамильтонианом \hat{H} .

Оператор, коммутирующий с гамильтонианом, ввиду инвариантности последнего относительно пространственных смещений замкнутой системы частиц называется оператором импульса:

$$\mathbf{p} = \sum_a (-i\nabla_a). \quad (2.10)$$

Следовательно, $\mathbf{p} = -i\nabla$ — оператор импульса отдельной частицы. Действительно, этот оператор, умноженный на постоянную Планка \hbar , имеет размерность импульса:

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla.$$

В настоящем разделе мы часто для краткости будем полагать $\hbar = 1$.

При операции бесконечно малого временного сдвига δt волновая функция преобразуется следующим образом:

$$\psi(t - \delta t) = \psi(t) - \delta t \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \left(1 + c\delta t \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}\right)\right) \psi(t). \quad (2.11)$$

В рамках релятивистской механики положение частицы задается 4-вектором

$$x_\mu = (\mathbf{r}, ict),$$

где $\mu = 1, 2, 3, 4$ и $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$, $x_4 = ict$. Оператор (2.10) и генератор преобразования (2.11) образуют 4-вектор следующего вида:

$$p_\mu = \left(-i\nabla, -i\frac{\partial}{\partial x_4}\right) = (\mathbf{p}, p_4), \quad (2.12)$$

где

$$p_4 = -i\frac{\partial}{\partial x_4} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}. \quad (2.13)$$

Для обозначения компонент 4-векторов мы будем использовать в дальнейшем греческие символы, для обозначения компонент трехмерных векторов будут использоваться латинские буквы.

Преобразование (2.9) показывает, что сохраняющейся величиной является только суммарный импульс замкнутой системы частиц. Сохранение суммарного импульса замкнутой системы взаимодействующих частиц позволяет сделать выводы относительно возможного вида гамильтониана взаимодействия частиц $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$. Действительно, введем координату центра масс системы:

$$\mathbf{r}_0 = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i,$$

где $M = \sum_{i=1}^N m_i$, а также $(N-1)$ векторов $\mathbf{r}_{i, i+1}$ (где $\mathbf{r}_{i, i+1} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}$). Тогда мы получаем

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{i, i+1}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{i-1, i}} + \frac{m_i}{M} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0}. \quad (2.14)$$

Отсюда следует, что

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{i, i+1}} - \sum_{i=2}^N \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{i-1, i}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0}.$$

Таким образом, оператор импульса центра масс коммутирует с гамильтонианом в случае, когда потенциальная энергия V взаимодействия частиц системы удовлетворяет условию

$$\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_0} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i} = 0.$$

В случае парного взаимодействия частиц, $V = \sum_{i,j} V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$, получаем

$$\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_0} = \sum_{k=1}^N \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_k} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}{\partial \mathbf{r}_i} + \frac{\partial V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}{\partial \mathbf{r}_j} \right].$$

Следовательно, оператор импульса центра масс замкнутой системы коммутирует в этом случае с гамильтонианом при выполнении условия

$$\frac{\partial V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}{\partial \mathbf{r}_i} = - \frac{\partial V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}{\partial \mathbf{r}_j}.$$

Отметим, что когда гамильтониан взаимодействия имеет вид $\sum_{i,j} V_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, последнее условие выполняется тождественно.

В случае когда мы исследуем движение одиночной частицы во внешнем поле, создаваемом макроскопическими телами, операция преобразования координат включает и преобразование координат самого макроскопического тела, т.е. его трансляции и вращения. Однако $\mathbf{r}_0 = 0$ при $M \rightarrow \infty$, поэтому анализ симметричных свойств системы удобнее проводить, используя вращения и трансляции частицы при заданном положении системы координат, связанной с неподвижным макроскопическим телом. Поскольку, как мы отмечали выше, операции над координатной системой и над частицей являются взаимно обратными, то вид 4-оператора импульса p_μ от этого не изменится. А ответ на вопрос о том, когда компоненты 4-оператора p_μ являются сохраняющимися величинами, можно получить из анализа коммутационных соотношений. Операторы (2.10) и (2.13) обладают следующими коммутационными свойствами:

$$[p_\mu, p_\nu] = 0, \quad (2.15)$$

$$[x_\mu, p_\nu] = i\delta_{\mu\nu}. \quad (2.16)$$

Коммутационные соотношения (2.15) и (2.16) показывают, что если гамильтониан не содержит явной зависимости от времени, то оператор p_4 коммутирует с ним. Для свободной частицы это приводит к уже упоминавшемуся выше ограничению, следующему из общих соображений

и состоящему в том, что гамильтониан свободной частицы не должен зависеть от времени. Для частицы, движущейся во внешних полях, это означает, что оператор p_4 отвечает сохраняющейся величине только в том случае, когда частица взаимодействует со статическими полями.

Из (2.16) следует, что оператор координаты не коммутирует также и с оператором \mathbf{p}^2 . Действительно, используя коммутационные соотношения (2.16), получаем

$$[\mathbf{r}, \mathbf{p}^2] = 2i\mathbf{p}.$$

В частном случае свободной частицы это тоже приводит к упоминавшемуся выше ограничению, состоящему в том, что если функция Лагранжа свободной частицы является линейной или квадратичной формой оператора \mathbf{p} (т.е. линейной или квадратичной формой $\nabla\psi$), то она не должна явно зависеть от пространственных координат частицы \mathbf{r} .

Следует отметить глубокую связь коммутационных соотношений (2.16) с представлениями классической физики. Действительно, хорошо известно, что импульс частицы, движущейся во внешнем поле, не является сохраняющейся величиной в общем случае. В зависимости от симметрии внешнего поля сохраняющимися могут быть лишь отдельные компоненты импульса.

Коммутационные соотношения (2.16) означают также, что потенциальная энергия частицы, являющаяся функцией координаты \mathbf{r} , и кинетическая энергия, имеющая в нерелятивистской классической механике вид $\mathbf{p}^2/2m$, не являются каждая в отдельности сохраняющимися величинами. Сохраняющейся величиной может быть лишь полная энергия, оператором которой является гамильтониан.

2.2.2. Трехмерные вращения. Рассмотрим операции бесконечно малых поворотов системы координат. Матрица a_{ij} может быть записана в этом случае в следующем виде:

$$a_{ij} = \delta_{ij} + \varepsilon_{ij}, \quad (2.17)$$

где матрица бесконечно малых поворотов ε_{ij} является антисимметричной. Действительно, подставляя (2.17) в (2.2), получаем

$$a_{ij}a_{ik} = (\delta_{ij} + \varepsilon_{ij})(\delta_{ik} + \varepsilon_{ik}) = \delta_{jk} + (\varepsilon_{jk} + \varepsilon_{kj}).$$

Отсюда следует

$$\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji}.$$

В случае поворота вокруг оси z на бесконечно малый угол $-\delta\theta$ матрица ε_{ij} имеет вид

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Используя (2.17) и (2.18), получаем

$$\begin{aligned} x' &= x - \delta\theta y, \\ y' &= y + \delta\theta x. \end{aligned}$$

Из последней формулы видно, что в общем случае

$$\mathbf{r}' - \mathbf{r} = [\delta\boldsymbol{\theta}\mathbf{r}]. \quad (2.19)$$

Таким образом, при трехмерных вращениях системы координат волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}_2, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \sum_a [\delta\boldsymbol{\theta}\mathbf{r}_a] \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{r}_a} = \\ &= \left(1 + i\delta\boldsymbol{\theta} \sum_a [\mathbf{r}_a \mathbf{p}_a] \right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Поскольку трехмерные вращения замкнутой системы не меняют энергии системы, то оператор преобразования (2.20) коммутирует с гамильтонианом. Генератор преобразования трехмерных вращений называется оператором углового момента:

$$\mathbf{l} = \sum_a [\mathbf{r}_a \mathbf{p}_a]. \quad (2.21)$$

Такое определение вполне естественно, поскольку получившаяся формула совпадает по виду с определением углового момента в классической механике.

Как мы видели в предыдущем разделе, преобразования пространственно-временных трансляций даже в нерелятивистском случае приводят к появлению четырехмерного оператора $p_\mu = (\mathbf{p}, p_4)$. Это связано с тем, что операция временного сдвига (2.5) может быть легко инкорпорирована в преобразования Галилея (2.1). Однако поскольку в рамках преобразования Галилея пространственные и временные координаты преобразуются независимо, то преобразования вращения приводят к появлению оператора (2.21), зависящего лишь от пространственных координат и их производных. Это явно свидетельствует о том, что в рамках нерелятивистских теорий пространственные и временные преобразования заведомо неравноценны и качественно отличаются от преобразований релятивистских теорий. Как мы увидим позже, отличия релятивистских и нерелятивистских преобразований приводят к принципиальному отличию релятивистских и нерелятивистских теорий, которые вполне предсказуемы, хотя бы потому что в релятивистской теории появляются новые операторы, являющиеся генераторами преобразований четырехмерных вращений.

Как мы уже отмечали в предыдущем разделе, при изучении симметрии задачи о движении одиночной частицы во внешнем поле, создаваемом макроскопическими телами, анализ симметричных свойств системы удобнее проводить, производя вращение частицы при заданном положении системы координат, связанной с неподвижными макроскопическими телами. Поскольку эти два преобразования являются взаимно обратными, то вид оператора углового момента остается неиз-

менным, а ответ на вопрос, при какой симметрии внешних полей угловой момент или его проекции являются сохраняющимися величинами, даст анализ коммутационных свойств оператора углового момента одиночной частицы $\mathbf{l} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ и введенных ранее операторов. Интересующие нас коммутационные соотношения имеют вид

$$[l_i, x_j] = i e_{ijk} x_k, \quad (2.22)$$

$$[l_i, p_j] = i e_{ijk} p_k, \quad (2.23)$$

$$[l_i, l_j] = i e_{ijk} l_k, \quad (2.24)$$

$$[l_i, x_4] = 0, \quad (2.25)$$

$$[l_i, p_4] = 0, \quad (2.26)$$

где e_{ijk} — абсолютно антисимметричный единичный тензор третьего ранга.

Из приведенных коммутационных соотношений видно, что оператор углового момента коммутирует с временной координатой и оператором p_4 . Однако он не коммутирует с операторами импульса и координаты частицы. Последнее обстоятельство очень важно, поскольку дает дополнительную информацию о виде функции Лагранжа свободной частицы. Действительно, мы уже отмечали, что функция Лагранжа свободной частицы не может зависеть явно от координат частицы, поскольку в этом случае появляется выделенное направление в пространстве.

Коммутационные соотношения (2.23) показывают, что функция Лагранжа свободной частицы не может также быть и линейной функцией оператора импульса, во всяком случае тогда, когда волновая функция является скалярной. Действительно, поскольку функция Лагранжа должна быть скалярной, то линейная зависимость от импульса означает появление в ней члена вида $\mathbf{A}\mathbf{p}$, где \mathbf{A} — некоторый трехмерный вектор. В случае свободной частицы вектор \mathbf{A} может быть связан лишь с ее внутренними степенями свободы. Однако поскольку частица, описываемая скалярной волновой функцией, не имеет внутренних степеней свободы, то никаких векторов, определяющих ее внутреннее состояние, не возникает. В случае частиц, описываемых многокомпонентными волновыми функциями, трансформационные свойства компонент векторного оператора \mathbf{A} должны быть таковы, чтобы произведение $\mathbf{A}\mathbf{p}$ оставалось инвариантным относительно преобразований координат, тогда сохраняющейся величине мог бы отвечать оператор $\mathbf{l} + \mathbf{B}$ (где \mathbf{B} — оператор, действующий на внутренние степени свободы частицы!), который коммутирует с оператором $\mathbf{A}\mathbf{p}$.

Используя коммутационные соотношения (2.23), несложно получить следующее соотношение:

$$\sum_j [l_i, p_j p_j] = i \sum_{j,k} e_{ijk} (p_k p_j + p_j p_k).$$

Отметим, что знак суммы по повторяющимся индексам здесь введен только для того, чтобы облегчить понимание дальнейших рассуждений. Учитывая антисимметричность первого сомножителя и симметричность второго относительно индексов j и k в сумме, стоящей в правой части последнего равенства, получаем

$$[\mathbf{l}, \mathbf{p}^2] = 0. \quad (2.27)$$

Таким образом, каждая из компонент оператора \mathbf{l} коммутирует с оператором \mathbf{p}^2 , но согласно (2.24) они не коммутируют друг с другом.

Учитывая симметрию коммутационных соотношений (2.23) и (2.24), нетрудно догадаться, что оператор \mathbf{l} коммутирует с оператором квадрата величины углового момента \mathbf{l}^2 :

$$[\mathbf{l}, \mathbf{l}^2] = 0. \quad (2.28)$$

Несложно видеть, что согласно (2.27) оператор \mathbf{l}^2 коммутирует и с оператором \mathbf{p}^2 , поскольку оператор \mathbf{l} коммутирует с ним. С учетом вышесказанного мы видим, что оператор углового момента и оператор кинетической энергии могут иметь общий набор собственных функций.

Преобразование (2.20), свидетельствующее о том, что оператор полного углового момента замкнутой системы частиц должен коммутировать с гамильтонианом, позволяет сделать ряд выводов о возможной структуре функции Лагранжа замкнутой системы частиц. Используя (2.14), получаем

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left[\mathbf{r}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \right] &= \sum_{i=1}^{N-1} \left[\mathbf{r}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{i, i+1}} \right] - \sum_{i=2}^N \left[\mathbf{r}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{i-1, i}} \right] + \sum_{i=1}^N \left[\frac{m_i \mathbf{r}_i}{M} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0} \right] = \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} \left[\mathbf{r}_{i, i+1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{i, i+1}} \right] + \left[\mathbf{r}_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0} \right]. \end{aligned}$$

Таким образом, полный угловой момент замкнутой системы частиц представляет собой сумму углового момента относительного движения частиц системы и углового момента центра масс. В системе центра масс полный угловой момент определяется только взаимным движением частиц системы, т. е. движением частиц относительно друг друга. Коммутационные соотношения оператора углового момента центра масс

$$\mathbf{l}_0 = -i \left[\mathbf{r}_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0} \right]$$

с операторами координаты и импульса центра масс определяются выражениями (2.22)–(2.24). Следовательно, в рамках теорий, функция Лагранжа которых содержит слагаемые, линейные по \mathbf{p} , угловой момент центра масс замкнутой системы частиц является сохраняющейся величиной только в том случае, когда гамильтониан системы не зависит от координаты и импульса центра масс. Если же функция Лагранжа является квадратичной формой оператора импульса, то оста-

ется лишь условие ее независимости от координаты центра масс. Это обстоятельство представляет интерес для анализа задач о взаимодействии легкой одиночной и тяжелой составной частиц, когда масса тяжелой частицы значительно превосходит массу одиночной частицы: $M \gg m$. В этом случае координата центра масс практически совпадает с координатой тяжелой частицы и вид гамильтониана взаимодействия позволяет легко оценить отношение вероятностей процессов, приводящих к изменению углового момента составной частицы без изменения ее внутренней структуры (т. е. без изменения внутреннего движения составляющих ее частиц) и изменяющих ее внутреннюю структуру. Имея эту информацию, мы можем легко сконструировать как общую функцию Лагранжа, так и функцию Лагранжа, удовлетворяющую либо тому, либо другому процессу.

Вернемся теперь снова к анализу симметричных свойств задачи о движении одиночной частицы во внешних полях, создаваемых макроскопическими телами. В задачах классической механики угловой момент сохраняется лишь при движении во внешних полях, обладающих центральной симметрией. В аксиально-симметричных полях сохраняется проекция углового момента на ось симметрии. Для того чтобы проследить аналогию классических и квантовых задач, удобно записать выражение для векторного оператора \mathbf{l} в сферической и цилиндрической системах координат.

В сферической системе координат оператор \mathbf{l} имеет вид

$$\mathbf{l} = \mathbf{e}_\theta \left(i \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \mathbf{e}_\varphi \left(-i \frac{\partial}{\partial \theta} \right). \quad (2.29)$$

Уже из полученной формулы видно, что угловой момент является сохраняющейся величиной, если частица движется во внешнем центрально-симметричном поле, когда ее потенциальная энергия зависит лишь от расстояния до центра притягивающего или отталкивающего внешнего скалярного поля: $U(\mathbf{r}) = U(r)$. Однако если при этом функция Лагранжа содержит слагаемые, линейные по оператору \mathbf{p} , то угловой момент не сохраняется ввиду соотношения (2.23) и сохраняется, если функция Лагранжа является квадратичной формой \mathbf{p} , в силу соотношений (2.27).

При анализе симметричных свойств различных задач весьма полезной оказывается связь операторов \mathbf{p}^2 и \mathbf{l}^2 . Эта связь может быть легко установлена из (2.29) и выражения для оператора \mathbf{p}^2 в сферических координатах:

$$\mathbf{p}^2 = -\Delta = -\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right).$$

Действительно, из (2.29) следует

$$\mathbf{l}^2 = - \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right).$$

Следовательно,

$$\mathbf{p}^2 = -\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{l}^2}{r^2}. \quad (2.30)$$

В связи с формулой (2.30) полезно сделать следующее интересное замечание. В отличие от осей декартовых координат, которые имеют одинаковое направление во всем пространстве, что в исходной, что в повернутой системе координат, направления осей криволинейных координат сами зависят от углов θ и φ , поэтому орты сферической системы координат не коммутируют с оператором \mathbf{l} . Как результат оператор \mathbf{l}^2 не равен сумме $l_\theta^2 + l_\varphi^2$. Это обстоятельство играет, например, существенную роль в общей теории относительности.

Соотношения (2.28), (2.29) и (2.30) однозначно показывают, что в рамках теорий, основанных на функции Лагранжа, являющейся квадратичной формой оператора \mathbf{p} , угловой момент свободной частицы является сохраняющейся величиной при произвольной зависимости гамильтониана от оператора p_4 .

В цилиндрической системе координат вектор углового момента имеет вид

$$\mathbf{l} = \mathbf{e}_z \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \mathbf{e}_\rho \left(i z \frac{\partial}{\rho \partial \varphi} \right) + \mathbf{e}_\varphi \left(-i \left(z \frac{\partial}{\partial \rho} - \rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \right).$$

Несложно видеть, что компонента l_z коммутирует сама с собой и со всеми остальными проекциями углового момента. Компоненты l_ρ и l_φ не коммутируют друг с другом. Следовательно, если частица движется во внешнем скалярном поле $U(\mathbf{r}) = U(\rho, z)$ или векторном поле $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}(\rho, z, t)$, энергия взаимодействия частицы с которым пропорциональна произведению $\mathbf{F}\mathbf{l}$, то в полной аналогии с уравнениями классической механики проекция углового момента l_z является сохраняющейся величиной.

2.2.3. Функция Лагранжа. Итак, проведенные выше обсуждения показывают, что функция Лагранжа свободной нерелятивистской частицы, описываемой комплексной скалярной волновой функцией, может быть линейной формой оператора p_4 и должна быть квадратичной формой оператора \mathbf{p} . Удовлетворяющая этим условиям функция Лагранжа имеет вид

$$L = i\hbar\psi^*\dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla\psi^*\nabla\psi. \quad (2.31)$$

В этом разделе мы используем определение оператора 4-импульса, учитывающее его размерность, т. е. $p_\mu = -i\hbar\nabla_\mu$. Вариация действия по волновой функции ψ^* приводит нас к следующему волновому уравнению для частицы:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi = 0. \quad (2.32)$$

Вариация действия по ψ приводит нас к уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi^* = 0, \quad (2.33)$$

которое является комплексно сопряженным с уравнением (2.32).

Решение волнового уравнения (2.32) в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp(-i(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar)$$

приводит к следующему соотношению между энергией частицы E и ее импульсом \mathbf{p} :

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}, \quad (2.34)$$

совпадающему с соответствующим выражением классической механики.

Следует отметить два существенных отличия функция Лагранжа (2.31) от функции Лагранжа классической частицы. Во-первых, в классической механике функция Лагранжа, позволяющая получить правильные уравнения движения частицы, зависит лишь от квадрата скорости частицы как в нерелятивистском, так и в релятивистском случае. Это объясняется тем, что ввиду однородности пространства и времени лагранжиан не может содержать в явном виде ни координат частицы, ни времени, а ввиду изотропии пространства он не может зависеть от направления движения частицы. В противоположность этому лагранжиан (2.31) включает в явном виде первую производную по времени от волновой функции. Инвариантное относительно операции обращения времени слагаемое $\psi^* \dot{\psi}$ в лагранжиане привело бы нас к дифференциальному уравнению второго порядка по времени. Следовательно, уравнение Шредингера выделяет одно из двух линейно независимых временных решений уравнения второго порядка. Во-вторых, функция Лагранжа (2.31) является комплексной, следовательно, выбираемое решение не может быть действительной функцией времени. Зависимость волновой функции от времени может выражаться лишь с помощью комплексной волновой функции времени, поскольку действие, основанное на функции Лагранжа (2.31),

$$S = \int \left(i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla \psi^* \nabla \psi \right) dV dt, \quad (2.35)$$

является самосопряженным только в том случае, когда волновая функция является комплексной. Если волновая функция является действительной, то действие, как мы упоминали выше, может быть лишь квадратичной формой оператора p_4 .

Из (2.31) следует, что импульс, канонически сопряженный с ψ , имеет вид

$$\pi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \psi^*. \quad (2.36)$$

Переменная $\dot{\psi}^*$ в функцию Лагранжа (2.31) не входит, следовательно, канонически сопряженный импульс π^* тождественно равен нулю. Функция Гамильтона в этом случае имеет вид

$$H = \frac{-i\hbar}{2m_0} \nabla \pi \nabla \psi.$$

Если мы симметризуем функцию Лагранжа, с тем чтобы сделать ее действительной, например

$$L = i\hbar (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla \psi^* \nabla \psi,$$

то оба сопряженных импульса становятся отличными от нуля. Однако, как несложно видеть, функция Гамильтона в этом случае перестает зависеть от ψ и ψ^* и производных от них. Следовательно, согласно (1.5) $\partial \pi / \partial t = 0$ и $\partial \pi^* / \partial t = 0$. Таким образом, условие $\pi^* = 0$ можно рассматривать как дополнительное условие, накладываемое на вид функции Лагранжа. При таком условии из двух возможных линейно независимых решений дифференциального уравнения второго порядка по времени выбирается то, которое приводит к правильному соотношению (2.34) между энергией частицы и ее импульсом: в соответствии с законами классической механики энергия частицы должна расти с увеличением импульса.

Следует отметить, что функция Лагранжа является вспомогательной величиной, поэтому на нее можно не накладывать условий действительности. Функция Лагранжа должна приводить к правильным уравнениям движения. Физически наблюдаемой величине соответствует функция Гамильтона, поскольку объемный интеграл от функции Гамильтона имеет смысл энергии системы:

$$E = \int H dV = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int \psi^* (\mathbf{r}, t) \Delta \psi (\mathbf{r}, t) dV.$$

2.2.4. Действие частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем. Действие частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, зависит как от переменных частицы, так и от потенциалов электромагнитного поля. Функция Лагранжа свободного электромагнитного поля имеет хорошо известный вид

$$L_f = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2), \quad (2.37)$$

где $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi$ — напряженность электрического поля и $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$.

Действие для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, является суммой действия свободного электромагнитного поля

и действия для свободной частицы, в котором используется следующая каноническая подстановка:

$$-i\hbar\nabla_\mu \rightarrow -i\hbar\nabla_\mu - \frac{q}{c}A_\mu, \quad (2.38)$$

где $A_\mu = (\mathbf{A}, i\varphi)$ — 4-потенциал электромагнитного поля.

Используя каноническую замену (2.38), для действия частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, получаем

$$\begin{aligned} S = & \frac{1}{8\pi} \int \int \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right)^2 - (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] dV dt + \\ & + \int \int \left[\psi^* \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - q\varphi \psi \right) - \frac{1}{2m_0} \left(i\hbar \nabla \psi^* - \frac{q}{c} \mathbf{A} \psi^* \right) \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{q}{c} \mathbf{A} \psi \right) \right] dV dt. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Вариация действия (2.39) по ψ^* приводит к волновому уравнению Шредингера для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\varphi \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.40)$$

Вариация действия по ψ приводит к комплексно сопряженному уравнению.

Варьирование действия (2.39) по \mathbf{A} и φ приводит к следующим уравнениям для скалярного и векторного потенциалов:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} + \text{rot rot } \mathbf{A} + \frac{1}{c} \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= 4\pi \mathbf{j}, \\ \Delta \varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{div } \mathbf{A} &= -4\pi \rho, \end{aligned} \quad (2.41)$$

где плотность заряда ρ и тока \mathbf{j} определяются равенствами

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= q |\psi(\mathbf{r}, t)|^2, \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{q}{2m_0} \left\{ \psi^* \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \psi + \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right]^* \psi \right\}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

При использовании калибровки Лоренца

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \text{div } \mathbf{A} = 0$$

уравнения (2.41) принимают вид

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \\ \Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} &= -4\pi \rho. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Следует отметить, что в рамках вероятностной интерпретации волновой функции частица является точечной и волновое поле частицы является полем вероятности нахождения частицы в заданной точке

пространства в данный момент времени, поэтому потенциалы электромагнитного поля, входящие в уравнение (2.42), создаются зарядами, внешними по отношению к рассматриваемой частице. Потенциалы электромагнитного поля, создаваемого самой частицей, определяются решением уравнений (2.43). Это поле существует вне области нахождения частицы в данный момент времени. Как видно из уравнений (2.43), электромагнитные поля, создаваемые частицей, распространяются со скоростью света. Скорость частицы меньше скорости света, поэтому можно сказать, что частица не успевает провзаимодействовать со своим собственным полем.

2.2.5. Пространственная инверсия. В разделе 2.1 мы отмечали, что полная группа преобразований координат, наряду с пространственно-временными трансляциями и трехмерными вращениями, включает в себя также пространственную инверсию и обращение времени. Эти преобразования являются дискретными, а соответствующие им симметрии имеют несколько различный смысл применительно к случаю свободной частицы, одиночной частицы во внешнем поле или же системы взаимодействующих частиц. В настоящем разделе мы остановимся на анализе симметричных свойств уравнения (2.40) для одиночной частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем.

При исследовании симметрии для непрерывных преобразований координат мы рассматривали преобразования, бесконечно близкие к тождественному преобразованию. Преобразования инверсии и обращения времени являются дискретными, поэтому в этом случае удобно воспользоваться другим приемом. Уравнение (2.40), записанное в преобразованной системе координат, имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi'(\mathbf{r}', t')}{\partial t'} = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p}' - \frac{q}{c} \mathbf{A}'(\mathbf{r}', t') \right)^2 + q\varphi'(\mathbf{r}', t') \right] \psi'(\mathbf{r}', t'). \quad (2.44)$$

Как мы отмечали выше, преобразование симметрии — это такое преобразование, которое не меняет результатов возможных исходов. Следовательно, если уравнение отвечает той или иной симметрии, то должно существовать преобразование, возвращающее уравнение (2.44) к его исходному виду в нештрихованной системе координат. Анализ симметричных свойств в этом случае сводится к поиску соответствующих преобразований.

Операции пространственной инверсии соответствует матрица a_{ij} :

$$a_{ij}^{(P)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Преобразование пространственной инверсии, так же как и преобразования отражения координатных осей, является дискретным преобразованием.

При операции пространственной инверсии волновая функция изменяется следующим образом:

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(a^{(P)}\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}).$$

Введем оператор пространственной инверсии P , определяющийся уравнением

$$P\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (2.45)$$

Его собственные значения определяются решением следующего уравнения:

$$P\psi(\mathbf{r}) = \lambda_p\psi(\mathbf{r}). \quad (2.46)$$

Действуя слева на обе части уравнения (2.45) оператором P , для собственных значений λ получаем

$$\lambda_p = \pm 1.$$

Таким образом, при пространственной инверсии однокомпонентная волновая функция либо меняет знак, либо не меняет. Следовательно, волновые функции уравнения Шредингера являются либо скалярными, либо псевдоскалярными.

Отметим, что в случае когда волновая функция является многокомпонентной, оператор P является матрицей, поэтому, в принципе, одни компоненты волновой функции могут быть скалярными функциями координат, а другие — псевдоскалярными.

Уравнения для классической частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем,

$$\frac{d\mathbf{p}'}{dt} = e\mathbf{E}' + \frac{1}{c}[\mathbf{v}'\mathbf{B}'],$$

остаются инвариантными относительно операции пространственной инверсии, если выполняются следующие условия:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}') = -\mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad \varphi'(\mathbf{r}') = \varphi(\mathbf{r}). \quad (2.47)$$

Действительно, в этом случае,

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}') = -\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{B}'(\mathbf{r}') = \mathbf{B}(\mathbf{r})$$

и, следовательно, подстановка $\mathbf{r}' \rightarrow -\mathbf{r}$ возвращает уравнение к исходному виду.

Несложно видеть, что при выполнении условий (2.47) уравнение (2.44) также преобразуется к исходному виду (2.40). Действительно, учитывая, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x'_i} \frac{\partial x'_i}{\partial x_j} = a_{ij} \frac{\partial}{\partial x'_i}, \\ p'_i &= a_{ij}^{(P)} p_j. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Таким образом, при выполнении условий (2.47) имеем

$$\frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p}' - \frac{q}{c} \mathbf{A}'(\mathbf{r}') \right)^2 + q\varphi'(\mathbf{r}') = \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + q\varphi(\mathbf{r}),$$

следовательно, волновая функция $\psi(-\mathbf{r}, t)$ является решением того же уравнения, что и функция $\psi(\mathbf{r}, t)$, а следовательно, может отличаться от нее лишь постоянным коэффициентом: $\psi(-\mathbf{r}, t) = C\psi(\mathbf{r}, t)$.

Следует отметить, что преобразования (2.47) имеют простой физический смысл. Действительно, точка $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ инвертированного пространства совпадает с точкой \mathbf{r} прямого, поэтому если координаты частиц или макроскопических тел, создающих внешнее поле, не подвергаются инверсии, то выполняются равенства (2.47).

2.2.6. Обращение времени. Операция обращения времени состоит в изменении знака времени: $t \rightarrow -t$. При изменении знака времени левая часть уравнения (2.40) меняет знак. Однако если мы сначала обратим время, а затем проведем операцию комплексного сопряжения, то уравнение (2.40) примет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_0} \left(i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, -t) \right)^2 + q\varphi(\mathbf{r}, -t) \right] \psi^*(\mathbf{r}, -t). \quad (2.49)$$

Таким образом, в (2.44) теперь имеем

$$\begin{aligned} \psi'(\mathbf{r}', t') &= \psi^*(\mathbf{r}, -t), & \mathbf{p}' &= -\mathbf{p}, & \mathbf{A}'(\mathbf{r}', t') &= \mathbf{A}(\mathbf{r}, -t), \\ \varphi'(\mathbf{r}', t') &= \varphi(\mathbf{r}, -t). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Несложно видеть, что гамильтониан уравнения (2.49) совпадает с гамильтонианом уравнения (2.40) при выполнении следующих условий:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t') = \mathbf{A}(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(\mathbf{r}, t') = \varphi(\mathbf{r}, -t) = \varphi(\mathbf{r}, t). \quad (2.51)$$

Здесь опять же проявляется аналогия с движением классической частицы. В классическом случае обращенное во времени движение имеет место лишь в случае, когда напряженность электрического поля не изменяется: $\mathbf{E}(-t) = \mathbf{E}(t)$, а вектор индукции магнитного поля меняет знак: $\mathbf{B}(-t) = -\mathbf{B}(t)$. Действительно, поскольку $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi$ и $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$, то напряженность электрического поля является четной функцией времени: $\mathbf{E}(-t) = \mathbf{E}(t)$, а вектор индукции магнитного поля нечетной: $\mathbf{B}(-t) = -\mathbf{B}(t)$, только при выполнении условий (2.51) для потенциалов поля.

Итак, в квантовой механике, основанной на уравнении Шредингера, симметрия по отношению к направлению времени выражается в изменении знака времени и одновременной замене волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ на комплексно сопряженную волновую функцию $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$. В этом случае наблюдаемые величины изменяются так же, как это происходит в классической физике.

2.2.7. Зарядовое сопряжение. Накладывая условия (2.51), мы полагали, что заряд частиц остается неизменным. Несложно видеть, что уравнение (2.49) можно свести к исходному и в случае, когда меняются знаки зарядов частиц: $q_{a,b} \rightarrow -q_{a,b}$. В этом случае замена волновой функции (2.50) должна сопровождаться следующей заменой потенциалов полей:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t') = \mathbf{A}(\mathbf{r}, -t) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(\mathbf{r}, t') = \varphi(\mathbf{r}, -t) \rightarrow -\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (2.52)$$

Это также согласуется с уравнениями классической физики.

Противоположная четность векторного и скалярного потенциалов по отношению к операции обращения времени вытекает из релятивистски инвариантного условия калибровки Лоренца, накладываемого на потенциалы электромагнитного поля:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0,$$

следовательно, нет необходимости рассматривать варианты, отличные от (2.51)–(2.52), поскольку они приводят к изменению калибровки поля, использованной нами в уравнениях (2.43).

2.3. Спинорные поля

Выше мы отмечали, что оператор преобразования волновой функции $W(a, b)$ удобно представить в виде произведения двух операторов:

$$W(a, b) = U(a)T(a, b), \quad (2.53)$$

где оператор $U(a)$ осуществляет преобразование формы волновой функции, а оператор $T(a, b)$ — преобразование аргументов. Такая факторизация возможна, поскольку в теории локальных полей эти два оператора действуют на разные степени свободы частицы, а потому являются коммутирующими. Поскольку законы преобразования каждой из компонент многокомпонентной волновой функции совпадают с законами преобразования скалярной функции, то анализ законов преобразования волновых функций спинорных полей естественно начать с исследования преобразований формы

$$\psi'(\mathbf{r}', t') = U(a)\psi(\mathbf{r}', t').$$

Символическая запись $U(a)$ означает, что преобразования формы зависят от всех преобразований симметрии, кроме преобразований пространственно-временных трансляций, которые не меняют проекций компонент многокомпонентной волновой функции на оси координат. Однако поскольку в нерелятивистском случае число компонент спинорной волновой функции отличается от размерности матриц трехмерных преобразований, рассматривавшихся выше, то ясно, что матрица $U(a)$ не связана непосредственно с матрицами a . Поэтому во избежание

недоразумений мы будем далее использовать для обозначения оператора преобразования формы символ U .

2.3.1. Оператор спина. В разделе 2.1 мы отмечали, что спинорные поля соответствуют частицам с полуцелым спином. Простейшим спинорным полем является поле частиц, обладающих собственным угловым моментом, или спином, $s = 1/2$. Поскольку проекция спина имеет два значения, $\sigma = +1/2$ и $\sigma = -1/2$, то волновая функция частицы $\psi_{s\sigma}(\mathbf{r}, t)$ является как минимум двухкомпонентной. В рамках нерелятивистской теории мы можем положить, что волновая функция является двухкомпонентной. Однако позже мы увидим, что требования релятивистской инвариантности приводят к тому, что в рамках релятивистских теорий волновая функция становится четырехкомпонентной.

Двухкомпонентную волновую функцию удобно представить в виде спинора, т. е. двухрядного столбца:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

При трехмерных преобразованиях системы координат изменения спинора (2.54) обусловлены в общем случае как изменением его аргумента, так и изменением его формы, т. е. преобразованием компонент спинора. Как мы отмечали выше, преобразования пространственно-временных трансляций не меняют величины проекций спина на оси координат, поэтому соответствующие законы преобразования скалярной и спинорной волновых функций совпадают. С другой стороны, при преобразовании трехмерных вращений проекции спина на новую и старую систему координат различаются, поэтому каждая из компонент спинорной волновой функции, отвечающая определенной величине проекции спина в повернутой системе, является линейной комбинацией компонент волновой функции в исходной системе отсчета.

Оператор преобразования формы спинорной волновой функции может быть представлен в виде (2×2) -матрицы:

$$\begin{pmatrix} \psi'_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi'_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (2.55)$$

Формула (2.55) отражает тот факт, что преобразования формы, связанные с внутренними степенями свободы движения частицы, являются точечными преобразованиями, т. е. связаны с преобразованием компонент волновой функции точечной частицы со спином $1/2$, помещенной в начало системы отсчета.

Элементы матрицы U являются в общем случае комплексными. В частности, если матрица U отвечает вращениям системы координат, то ее комплексные элементы должны быть функциями углов поворота, а структура матрицы должна отвечать определенным требованиям. Основное требование состоит в том, что преобразование (2.55) не

должно менять вероятности нахождения частицы в определенной точке пространства в данный момент времени. Следовательно,

$$\psi'^+ (\mathbf{r}, t) \psi' (\mathbf{r}, t) = \psi^+ (\mathbf{r}, t) \psi (\mathbf{r}, t). \quad (2.56)$$

Подставляя (2.55) в левую часть (2.56), получаем

$$\begin{aligned} \psi'^+ \psi' = & (|a|^2 + |c|^2) \psi_1^* \psi_1 + (|b|^2 + |d|^2) \psi_2^* \psi_2 + \\ & + (b^* a + d^* c) \psi_2^* \psi_1 + (a^* b + c^* d) \psi_1^* \psi_2. \end{aligned}$$

Таким образом, равенство (2.56) будет выполняться, если мы потребуем, чтобы элементы матрицы U удовлетворяли следующим условиям:

$$ad - bc = 1, \quad (2.57)$$

и

$$a = d^*, \quad b = -c^*. \quad (2.58)$$

Условие (2.57) является условием унитарности матрицы U . С учетом (2.58) для эрмитово-сопряженной матрицы получаем

$$U^+ = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ c^* & a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} = U^{-1}.$$

Следовательно, матрица U является унитарной:

$$U^+ U = I.$$

В силу условий (2.57) и (2.58) четыре комплексные величины: a , b , c , d , зависят лишь от трех вещественных параметров, которые определяют три угла поворота трехмерной системы координат. Используя равенства (2.58), матрицу U можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a' + ia'' & b' + ib'' \\ -b' + ib'' & a' - ia'' \end{pmatrix} = \\ &= a' \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i \left[b'' \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + b' \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + a'' \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right], \end{aligned} \quad (2.59)$$

где четыре действительных коэффициента, a' , b'' , b' и a'' , в силу соотношений (2.57), (2.58) связаны условием

$$a'^2 + a''^2 + b'^2 + b''^2 = 1.$$

Четыре (2×2) -матрицы, вошедшие в правую часть уравнения (2.59), называются матрицами Паули и составляют полный набор линейно независимых (2×2) -матриц:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

Матрицы Паули σ_i обладают следующими свойствами:

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = I, \quad (2.61)$$

$$\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3, \quad \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1, \quad \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2, \quad (2.62)$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2ie_{ijk}\sigma_k. \quad (2.63)$$

С учетом всего вышесказанного, из (2.59) следует, что матрица бесконечно малых трехмерных вращений может быть записана в виде

$$U = I + iC\delta\theta\mathbf{s}, \quad (2.64)$$

где C — константа, величина которой будет определена ниже (см. раздел 2.3.4), а \mathbf{s} — оператор спина:

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1\sigma_1 + \mathbf{e}_2\sigma_2 + \mathbf{e}_3\sigma_3). \quad (2.65)$$

Отметим, что, используя равенства (2.58), правило преобразования комплексно сопряженных компонент спинора можно записать в следующем виде:

$$\psi_2^{t*} = a\psi_2^* + b(-\psi_1^*), \quad \psi_1^{t*} = c(-\psi_2^*) + d\psi_1^*.$$

Отсюда следует, что компоненты ψ_1^* и ψ_2^* преобразуются как ψ_2 и $-\psi_1$ соответственно. Это свойство волновых функций частицы с полуцелым спином непосредственно связано со свойством симметрии уравнений относительно операции обращения времени. Уравнение Шредингера инвариантно относительно замены $t \rightarrow -t$ и $\psi \rightarrow \psi^*$. Но при обращении времени меняют знак и проекции момента импульса, следовательно, инвариантность относительно указанного преобразования сохраняется и для частицы с полуцелым спином, если компоненты комплексно сопряженного спинора отвечают компонентам исходного спинора с противоположным знаком проекции спина.

2.3.2. Уравнение Паули. Оператор спина (2.65) является векторным оператором, поэтому ясно, что он может войти в гамильтониан лишь в виде скалярного произведения с некоторым вектором или векторной функцией

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)\mathbf{s}.$$

Поскольку наличие собственного углового момента частиц было обнаружено при их взаимодействии с магнитным полем, то вектор \mathbf{V} должен быть связан с вектором напряженности магнитного поля, а следовательно, оператор спина должен быть связан с магнитным моментом частицы:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{\mu_0}{s}\mathbf{s} = \mu_0\boldsymbol{\sigma}, \quad (2.66)$$

где s — величина спина, а μ_0 — величина магнитного момента частицы.

Следует отметить, что введение спина не может привести к появлению в гамильтониане членов, отвечающих энергии электродипольного взаимодействия, пропорционального $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{E}$. Действительно, как вектор

углового момента, так и вектор магнитного момента являются аксиальными векторами, поэтому в обеих частях равенства (2.66) стоят векторы, обладающие одинаковыми трансформационными свойствами. С другой стороны, электрический дипольный момент частицы \mathbf{d} , являясь полярным вектором, не может быть пропорционален аксиальному вектору $\boldsymbol{\sigma}$. В рамках теории, основанной на использовании двухрядных волновых функций $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$, в качестве оператора электрического дипольного момента могла бы выступать величина вида $[\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}]$. Однако представление даже расширенной группы трехмерных преобразований координат не включает указанного оператора.

Таким образом, энергия взаимодействия внутреннего углового момента частицы со спином $1/2$ с электромагнитным полем определяется выражением

$$H_M = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}. \quad (2.67)$$

Учитывая (2.53), несложно видеть, что функция Лагранжа свободной нерелятивистской частицы со спином $1/2$ совпадает по виду с (2.31), а действие для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, отличается от действия (2.39) наличием дополнительного слагаемого, описывающего взаимодействие магнитного момента частицы с внешним магнитным полем:

$$\begin{aligned} S = & \frac{1}{8\pi} \iint \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\varphi \right)^2 - (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] dV dt + \\ & + \iint \left[i\hbar\psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{1}{2m_0} \left(i\hbar\nabla\psi^+ - \frac{q}{c} \mathbf{A}\psi^+ \right) \left(-i\hbar\nabla\psi - \frac{q}{c} \mathbf{A}\psi \right) - \right. \\ & \left. - \psi^+ (q\varphi - \boldsymbol{\mu}\mathbf{B}) \psi \right] dV dt. \quad (2.68) \end{aligned}$$

Вариация действия по ψ^+ приводит нас к уравнению Паули

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\varphi - \boldsymbol{\mu}\mathbf{B} \right] \psi. \quad (2.69)$$

Варьируя действие по потенциалам электромагнитного поля, мы снова получаем уравнения (2.41), которые с использованием лоренцевской калибровки приводятся к виду

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \\ \Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} &= -4\pi\rho. \end{aligned}$$

Однако 4-вектор плотности тока, входящий в эти уравнения, отличается от 4-вектора шредингеровского тока и принимает вид

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= q\psi^+(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{iq\hbar}{2m_0} (\nabla\psi^+ \cdot \psi - \psi^+ \cdot \nabla\psi) - \frac{q^2}{m_0c} \psi^+ \mathbf{A}\psi + \text{crot}(\psi^+ \boldsymbol{\mu}\psi). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Несложно видеть, что 4-вектор плотности тока (2.70), так же как и 4-вектор плотности тока уравнения Шредингера, удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0.$$

2.3.3. Специфика спинорных волновых функций. Несмотря на близость и внешнее сходство уравнений для волновых функций скалярных (2.40) и спинорных (2.69) полей, между ними существует ряд принципиальных отличий.

Первое отличие связано с интерпретацией уравнений (2.70) для компонент 4-вектора плотности тока. Уравнения (2.70) получены применением канонических процедур к действию (2.68). Несмотря на проведенный подробный и объемный анализ преобразований симметрии, выражение для действия (2.68) является постулатом теории. Если же постулируется не действие (2.68), а само уравнение (2.69), то уравнение непрерывности, являющееся динамическим инвариантом уравнений, меняет свой вид. Действительно, запишем уравнение для волновой функции, эрмитово-сопряженной волновой функции уравнения (2.69). Оно имеет вид

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} = \psi^+ \left[\frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\varphi - \boldsymbol{\mu} \mathbf{B} \right],$$

где мы учли, что матрицы $\boldsymbol{\sigma}$, определенные равенствами (2.60), являются эрмитовыми. Умножая обе части последнего уравнения справа на ψ , а обе части уравнения (2.69) слева на ψ^+ и взаимно вычитая получившиеся уравнения, получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^+ \psi) = \frac{1}{2m_0} \left[\psi^+ \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi - \left(\mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi^+ \cdot \psi \right],$$

где, как и ранее, принято соглашение, согласно которому оператор действует лишь на волновую функцию, стоящую по одну с ним сторону от точки. Путем несложных преобразований это уравнение приводится к виду уравнения непрерывности. Получающиеся выражения для плотности потока имеют вид

$$\begin{aligned} \rho_t(\mathbf{r}, t) &= \psi^+(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{j}_t(\mathbf{r}, t) &= \frac{i\hbar}{2m_0} (\nabla\psi^+ \cdot \psi - \psi^+ \nabla\psi) - \frac{q}{m_0c} \psi^+ \mathbf{A}\psi. \end{aligned}$$

Плотность потока \mathbf{j}_t совпадает с плотностью шредингеровского потока, т. е. с плотностью потока бесструктурной частицы, не имеющей внут-

ренных степеней свободы. Следовательно, слагаемое $q\mathbf{j}_t$ в плотности тока (2.70) связано с трансляционным движением частицы как целого. Второе слагаемое в плотности тока (2.70),

$$\mathbf{j}^{(2)}(\mathbf{r}, t) = c\mu_0 \operatorname{rot}(\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma}\psi),$$

связано с внутренними степенями свободы движения частицы. Действительно, мы видим, что это слагаемое зависит от спиновых операторов, в то время как первое слагаемое от спиновых операторов не зависит.

Таким образом, \mathbf{j}_t и ρ_t образуют 4-вектор плотности потока материального поля, связанного с трансляционным движением частицы как целого. Компоненты этого 4-вектора удовлетворяют уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_t = 0.$$

Для частиц, имеющих внутреннюю структуру, компоненты 4-вектора тока включают дополнительные слагаемые, которые обусловлены внутренним движением частицы. Вместе с тем 4-вектор тока (2.70) также удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

Функция Лагранжа для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, позволяет легко определять вид 4-вектора плотности тока.

Второе существенное отличие спинорных волновых функций от скалярных состоит в следующем. Собственные волновые функции стационарного уравнения Шредингера являются решениями следующей краевой задачи:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) \right) u_n(\mathbf{r}) = E_n u_n(\mathbf{r}).$$

Граничные условия для волновых функций дискретного спектра состоят в условиях конечности волновой функции при $r \rightarrow 0$ и равенстве нулю при $r \rightarrow \infty$. Пусть частица совершает одномерное движение между двумя абсолютно непроницаемыми стенками, являющимися плоскостями $x = 0$ и $x = L$. Тогда собственные значения энергии определяются выражением

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_0 L^2},$$

а соответствующие им собственные волновые функции имеют вид

$$u_n(x) = C_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right).$$

Константы C_n находятся из условия нормировки

$$\int_0^L |u_n(x)|^2 dx = 1,$$

откуда получаем

$$|C_n| = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

В принципе, константы C_n могут иметь произвольные фазовые множители: $C_n = |C_n| \exp(i\varphi_n)$. Однако постоянные множители не влияют ни на вероятность $p_n(x) = |u_n(x)|^2$ нахождения частицы в точке x , ни на квантово-механические средние наблюдаемых величин. Следовательно, задание нормы волновой функции однозначно определяет состояние частицы с энергией E_n .

С другой стороны, решение указанной краевой задачи для спинорной волновой функции имеет вид

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \left[A_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + B_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \sin\left(\frac{\pi n}{L}\right).$$

Константы A_n и B_n являются комплексными числами, поэтому для их однозначного задания необходимо иметь четыре действительных уравнения. Условие нормировки дает одно из необходимых уравнений

$$\left(|A_n|^2 + |B_n|^2\right) \frac{L}{2} = 1.$$

Этого условия достаточно лишь для задания трансляционной части волновой функции, внутреннее состояние частицы при этом остается неопределенным. Внутреннее состояние частицы определяется заданием следующей наблюдаемой величины:

$$\mathbf{m}_n = \mu_0 \int \psi_n^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \psi_n(\mathbf{r}) dV.$$

Действительно, для компонент вектора \mathbf{m} получаем

$$\begin{aligned} m_1 &= \mu_0 (A_n^* B_n + B_n^* A_n) \frac{L}{2}, \\ m_2 &= -i\mu_0 (A_n^* B_n - B_n^* A_n) \frac{L}{2}, \\ m_3 &= \mu_0 \left(|A_n|^2 - |B_n|^2\right) \frac{L}{2}. \end{aligned}$$

Таким образом, если норма волновой функции однозначно задает состояние частицы, описываемой скалярной волновой функцией, то для однозначного определения состояния частицы, описываемой спинорной волновой функцией, наряду с заданием нормы волновой функции, необходимо задавать значения и трех компонент магнитного момента частицы, определяющих ее внутреннее состояние. Отметим, что в от-

существование магнитного поля оператор спина коммутирует с гамильтонианом уравнения Паули (2.69), поэтому его компоненты могут быть заданы одновременно с энергией.

2.3.4. Трехмерные вращения. Рассмотрим симметричные свойства уравнения (2.69) относительно преобразований формы при трехмерных вращениях, т. е. будем считать, что координаты частицы остаются неизменными. В повернутой системе координат уравнение (2.69) принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi'(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p}' - \frac{q}{c} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\varphi(\mathbf{r}, t) - \mu_0 \mathbf{B}'(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\sigma} \right] \psi'(\mathbf{r}, t). \quad (2.71)$$

Преобразования формы трехмерных векторов при вращениях системы координат имеют вид

$$B'_i(\mathbf{r}, t) = a_{ij} B_j(\mathbf{r}, t), \quad (2.72)$$

где a_{ij} — матрица трехмерных вращений. Умножая обе части уравнения (2.71) слева на матрицу U^{-1} , несложно видеть, что уравнение (2.71) возвращается к исходной нештрихованной форме, если выполняется равенство

$$a_{ij} B_j U^{-1} \sigma_i U = B_i \sigma_i. \quad (2.73)$$

Учитывая свойство матрицы преобразования a_{ij} , определяемое равенством (2.2), из (2.73) получаем

$$U^{-1} \sigma_i U = a_{ij} \sigma_j. \quad (2.74)$$

В случае бесконечно малого вращения матрица преобразования U будет отличаться от тождественной наличием бесконечно малой добавки

$$U = I + \Gamma_{ij} \varepsilon_{ji}. \quad (2.75)$$

Подставляя (2.75) в (2.74), получаем

$$(\sigma_i \Gamma_{kl} - \Gamma_{kl} \sigma_i) \varepsilon_{lk} = \varepsilon_{ij} \sigma_j. \quad (2.76)$$

Учитывая свойства матриц Паули (2.61)–(2.62), несложно видеть, что Γ_{kl} являются билинейными комбинациями матриц σ_k и σ_l :

$$\Gamma_{kl} = C \sigma_k \sigma_l, \quad (2.77)$$

где C — константа. Подставляя (2.77) в (2.76) и учитывая антисимметричность тензора ε_{ij} , получаем

$$C (\sigma_i \sigma_k \sigma_l - \sigma_k \sigma_l \sigma_i) = \frac{1}{2} (\sigma_k \delta_{il} - \sigma_l \delta_{ik}). \quad (2.78)$$

Путем несложных преобразований для константы C получаем

$$C = -\frac{1}{4}.$$

Таким образом, для матрицы U получаем

$$U = I - \frac{1}{4} \sigma_i \sigma_j \varepsilon_{ji}.$$

Рассмотрим вращение вокруг оси z :

$$x' = x \cos \theta - y \sin \theta, \quad y' = y \cos \theta + x \sin \theta. \quad (2.79)$$

Матрица бесконечно малого вращения имеет вид

$$U = I + \frac{i}{2} \delta \theta \sigma_3.$$

Матрица вращения вокруг произвольной оси имеет вид

$$U = I + \frac{i}{2} \delta \theta \mathbf{n} \sigma. \quad (2.80)$$

Из (2.80) может быть получена матрица вращения на конечные углы. Действительно, учитывая аддитивность поворотов, получаем

$$U(\theta) = \left[U \left(\frac{\theta}{N} \right) \right]^N.$$

При $N \rightarrow \infty$ получаем

$$U = \exp \left(\frac{i}{2} \theta \mathbf{n} \sigma \right), \quad (2.81)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор оси вращения.

2.3.5. Инверсия спиноров. Учитывая свойства матриц Паули, получаем

$$\sigma_i^{2n} = I, \quad \sigma_i^{2n+1} = \sigma_i,$$

где n — целое положительное число. Следовательно, выражение (2.81) можно переписать в следующем виде:

$$U = \cos \frac{\theta}{2} + i \mathbf{n} \sigma \sin \frac{\theta}{2}. \quad (2.82)$$

Из формулы (2.82) непосредственно следует неоднозначность спинорных волновых функций. Полагая $\theta = 2\pi$, получаем: $U(2\pi) = -1$. Поскольку, однако, поворот на 2π возвращает координатные оси в исходное положение, то мы видим, что спинорные волновые функции определены с точностью до знака.

Формула (2.82) определяет также закон преобразования спиноров при отражении четного числа пространственных осей. Рассмотрим преобразование пространственной инверсии. Проводя инверсию дважды, мы возвращаемся к исходной системе координат. Возвращение к исходной системе можно рассматривать двояко: как поворот на 0 градусов или поворот на 2π . Для спиноров две эти операции различны, поскольку поворот на 2π , как мы видели, меняет знак. Следовательно, собственные значения оператора четности определяются либо уравнением $p^2 = 1$, либо уравнением $p^2 = -1$. В первом случае, так же как

и для скалярной волновой функции, получаем: $p_{1,2} = \pm 1$. Во втором случае $p_{3,4} = \pm i$.

Появление двух состояний четности в теории скалярных полей связано с квадратичной зависимостью гамильтониана уравнения Шредингера от оператора импульса. Уравнение для спинорной волновой функции с гамильтонианом, являющимся квадратичной формой оператора импульса, является в общем случае системой двух связанных уравнений второго порядка по пространственным производным для двух компонент спинора. Таким образом, появление четырех собственных значений оператора четности неудивительно, поскольку операция инверсии включает в этом случае не только преобразование аргументов волновой функции, связанное с трансляционным движением частицы, но и преобразование формы (т.е. компонент спинора), связанное с ее внутренней структурой. Отметим, что поскольку уравнения Шредингера и Паули несимметричны относительно временных и пространственных производных, то требования, накладываемые на структуру волновой функции для описания внутреннего строения частиц, будут отличаться от требований теорий, основанных на использовании уравнений, симметричных относительно временных и пространственных производных.

Следует отметить, что поскольку при повороте на 2π спинор меняет знак, то понятие четности не имеет абсолютного смысла для спинорных волновых функций уравнения Паули (2.69). Абсолютный смысл имеет лишь понятие относительной четности двух спиноров, определяемой как четность составленного из них скалярного произведения. При повороте на 2π оба спинора меняют знак, поэтому относительная четность при этом остается неизменной.

Понятие четности состояния является одним из наглядных примеров общего утверждения о том, что полное представление о структуре и свойствах частиц мы можем получить, лишь рассматривая их взаимодействия, поэтому мы не будем останавливаться здесь на этом вопросе, а вернемся к нему, когда перейдем к анализу многочастичных задач.

2.3.6. Связь спинорного и тензорного представлений группы трехмерных вращений. Преобразования скалярной волновой функции являются простейшим видом тензорных преобразований, а преобразования волновой функции частицы со спином $1/2$ — простейшим видом спинорных преобразований. Тензорное и спинорное представления группы трехмерных вращений были определены нами в разделах 2.2.2 и 2.3.4 соответственно. На самом деле эти два представления являются частными случаями общего представления, справедливого для произвольной размерности волновой функции (см., например, [20]), т.е. алгебры, соответствующие различным представлениям, оказываются изоморфны. Остановимся здесь, однако, лишь на сравнении двух обсуждавшихся представлений.

Преобразование скалярной волновой функции при трехмерных вращениях системы координат можно записать в следующем виде:

$$\psi(\mathbf{r}') = S(\varepsilon, \mathbf{0})\psi(\mathbf{r}) = \left(1 + \frac{i}{2}\varepsilon_{ij}L_{ji}\right)\psi(\mathbf{r}), \quad (2.83)$$

где

$$\varepsilon_{ij} = -e_{ijk}\delta\theta_k$$

и

$$L_{ij} = -i\left(x_i\frac{\partial}{\partial x_j} - x_j\frac{\partial}{\partial x_i}\right). \quad (2.84)$$

Несложно видеть, что

$$l_1 = L_{23}, \quad l_2 = L_{31}, \quad l_3 = L_{12}. \quad (2.85)$$

Операторы L_{ij} удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$i[L_{ij}, L_{mn}] = L_{in}\delta_{jm} - L_{jn}\delta_{im} + L_{jm}\delta_{in} - L_{im}\delta_{jn}. \quad (2.86)$$

Преобразование формы спинорной волновой функции при трехмерных вращениях системы координат определяется выражением

$$\psi'(\mathbf{r}') = U(\varepsilon, \mathbf{0})\psi(\mathbf{r}') = \left(I + \frac{1}{4}\varepsilon_{ij}\sigma_j\sigma_i\right)\psi(\mathbf{r}'). \quad (2.87)$$

Учитывая свойства матриц Паули, это выражение можно переписать в виде

$$\psi'(\mathbf{r}') = U(\varepsilon, \mathbf{0})\psi(\mathbf{r}') = \left(I + \frac{i}{2}\varepsilon_{ij}L_{ij}^{(\sigma)}\right)\psi(\mathbf{r}'),$$

где

$$L_{ij}^{(\sigma)} = -\frac{i}{4}(\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i). \quad (2.88)$$

Поскольку тензор ε_{ij} является антисимметричным, то индексы i и j в произведении матриц Паули в формуле (2.87) оказываются различными. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, в определении тензора $L_{ij}^{(\sigma)}$ указанное произведение записано в антисимметричном виде.

Покажем, что коммутационные соотношения оператора $L_{ij}^{(\sigma)}$ совпадают с коммутационными соотношениями (2.86) оператора L_{ij} . Используя коммутационные соотношения (2.63) для матриц Паули, несложно получить коммутационные соотношения оператора (2.88) и матриц Паули:

$$\left[L_{ij}^{(\sigma)}, \sigma_n\right] = -i\sigma_i\delta_{jn} + i\sigma_j\delta_{in}. \quad (2.89)$$

Домножая коммутационные соотношения (2.89) слева на σ_m , а коммутационные соотношения для матрицы σ_m справа на матрицу σ_n и складывая получившиеся равенства, получаем

$$L_{ij}^{(\sigma)}\sigma_n\sigma_m - \sigma_n\sigma_m L_{ij}^{(\sigma)} = -i\sigma_i\sigma_m\delta_{jn} - i\sigma_n\sigma_i\delta_{jm} + i\sigma_j\sigma_m\delta_{in} + i\sigma_n\sigma_j\delta_{im}.$$

Отсюда сразу следует, что коммутационные соотношения оператора (2.88) совпадают с требуемыми коммутационными соотношениями (2.86):

$$i \left[L_{ij}^{(\sigma)}, L_{mn}^{(\sigma)} \right] = L_{in}^{(\sigma)} \delta_{jm} - L_{jn}^{(\sigma)} \delta_{im} + L_{jm}^{(\sigma)} \delta_{in} - L_{im}^{(\sigma)} \delta_{jn}.$$

Таким образом, генератором преобразования трехмерных вращений спинорной волновой функции является антисимметричный тензор $L_{ij}^{(\sigma)}$, определяемый выражением (2.88). Поскольку свободное пространство однородно, то ясно, что оператор $L_{ij}^{(\sigma)}$ не может входить в гамильтониан свободной частицы. Появление внешнего электромагнитного поля нарушает симметрию пространства. Неэквивалентность различных пространственных положений частицы как целого в электромагнитном поле учитывается канонической заменой $p_\mu \rightarrow p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu$. Однако для частицы, обладающей спином, нарушается не только трансляционная, но и ориентационная инвариантность (связанная с ее внутренними степенями свободы), поскольку векторы напряженности электрического и магнитного полей электромагнитной волны задают выделенные направления в пространстве. Гамильтониан ориентационного (или спинового) взаимодействия неподвижной частицы с электромагнитным полем зависит от генератора группы трехмерных вращений спинорной волновой функции. Из общих соображений ясно, что поскольку оператор $L_{ij}^{(\sigma)}$ является антисимметричным тензором, то гамильтониан взаимодействия будет содержать произведение оператора $L_{ij}^{(\sigma)}$ и антисимметричного тензора, зависящего от обобщенных координат электромагнитного поля. Таковым является тензор электромагнитного поля

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu}. \quad (2.90)$$

Тензор $F_{\mu\nu}$ имеет релятивистски инвариантную форму. Однако в рамках нерелятивистских теорий пространственные и временная координаты не являются эквивалентными, поэтому, с учетом того что $L_{ij}^{(\sigma)}$ зависит лишь от пространственных координат, в нерелятивистском случае гамильтониан взаимодействия будет включать в себя лишь пространственные компоненты тензора электромагнитного поля. Следовательно, ориентационную (или спиновую) часть гамильтониана взаимодействия можно записать в виде

$$H_{\text{int}}^{(\sigma)} = \mu_0 L_{ij}^{(\sigma)} F_{ji}, \quad (2.91)$$

где μ_0 — константа. Подставляя сюда выражения (2.88) и (2.90), получаем

$$H_{\text{int}}^{(\sigma)} = -\mu_0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}. \quad (2.92)$$

Таким образом, соображения, основанные на учете трансформационных свойств гамильтониана относительно преобразований координат, приводят нас к выводу, что ориентационная часть гамильтониана

взаимодействия частицы с полуцелым спином с электромагнитным полем имеет вид (2.92). Несложно видеть, что это выражение совпадает с формулой (2.67), предложенной ранее исходя из полуэмпирических соображений.

Рассматривая преобразования симметрии для спинорных волновых функций, мы остановились практически на всех преобразованиях, входящих в расширенную группу трехмерных преобразований. Естественно, что не все из этих преобразований обсуждались одинаково подробно, поскольку представления ряда подгрупп общей группы преобразований идентичны для скалярных и спинорных полей.

Глава 3

ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИММЕТРИИ В РЕЛЯТИВИСТСКОМ СЛУЧАЕ

Даже расширенная группа трехмерных преобразований координат является подгруппой «3 + 1» группы четырехмерных преобразований, основанной на преобразованиях Лоренца. Естественно поэтому ожидать, что представление группы преобразований Лоренца будет содержать операторы, которые не сводятся к тривиальной суперпозиции операторов, отвечающих подгруппе трехмерных преобразований. Естественно также, что именно данные операторы, специфичные только для представления группы преобразований Лоренца, отражают коренные различия свойств частиц в рамках релятивистских и нерелятивистских теорий. Исходя из связи спинорного и тензорного представлений группы трехмерных вращений, отмеченной в конце предыдущей главы, ясно, что эти новые операторы должны появляться одновременно как в случае скалярных, так и в случае спинорных полей. Поскольку, как указано в предыдущей главе, операторы, отвечающие преобразованиям формы и преобразованиям аргументов волновой функции, являются коммутирующими, то, так же как и в предыдущей главе, удобно рассмотреть сначала представление группы преобразований Лоренца для скалярных полей, а затем обратиться к анализу преобразований формы для спинорных полей.

3.1. Группа преобразований Лоренца

В релятивистском случае положение частицы задается 4-вектором

$$x_\mu = (\mathbf{r}, ict).$$

Если в качестве пространственной системы координат мы будем использовать декартовы координаты, то компоненты вектора x_μ примут вид: $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$, $x_4 = ict$. Рассмотрим частицу, состояние которой в различные моменты времени может адекватно описываться скалярной волновой функцией

$$\psi(x) = \psi(\mathbf{r}, t).$$

В соответствии с общим принципом относительности наблюдаемые результаты процессов взаимодействия частиц друг с другом или с внешними полями должны быть одинаковы вне зависимости от того, в какой системе отсчета мы производим измерения, например, вне зависимости от того, наблюдаем ли мы эти взаимодействия в неподвижной

системе отсчета или же в системе отсчета, движущейся относительно «неподвижной» системы отсчета. Это означает, что должны существовать преобразования, которые сводят уравнения, описывающие взаимодействие частиц в различных системах отсчета, к единой форме. Преобразования Лоренца, в отличие от преобразований Галилея, включают и временную координату, следовательно, уравнения движения должны быть инвариантны не только по отношению к трехмерным вращениям системы координат, которые оставляют неизменной длину трехмерного вектора,

$$(\Delta \mathbf{r}')^2 = (\mathbf{r}'_a - \mathbf{r}'_b)^2 = (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)^2 = (\Delta \mathbf{r})^2,$$

но и по отношению к четырехмерным вращениям, оставляющим неизменным интервал между двумя событиями:

$$c^2(\Delta t')^2 - (\Delta \mathbf{r}')^2 = c^2(\Delta t)^2 - (\Delta \mathbf{r})^2.$$

Так же как и в нерелятивистском случае, операции, производимые над замкнутой системой частиц, и операции, производимые над системой отсчета, являются взаимно обратными. Действительно, пространственный сдвиг всех частиц замкнутой системы на вектор $\Delta \mathbf{r}$ или сдвиг начала отсчета времени на величину Δt приводят к тому, что 4-вектор изменяется на величину $\Delta x = (\Delta \mathbf{r}, \Delta t)$. В то же время пространственно-временная трансляция системы отсчета на вектор Δx приводит к тому, что координаты частиц в новой системе отсчета принимают значения $x'_a = x_a - \Delta x$.

Преобразования системы координат в четырехмерном пространстве имеют вид

$$x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu + b_\mu, \quad (3.1)$$

где матрица преобразования $a_{\mu\nu}$ удовлетворяет свойствам, аналогичным свойствам матриц трехмерных преобразований:

$$a_{\mu\nu} a_{\mu\lambda} = \delta_{\nu\lambda}. \quad (3.2)$$

Преобразования (3.1) включают, естественно, и тождественное преобразование

$$a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}, \quad b_\mu = 0.$$

Так же как и в случае трехмерных преобразований, преобразования, получающиеся из тождественного путем непрерывного изменения параметров преобразования, называются непрерывными.

Классификация преобразований координат в релятивистском случае весьма близка к классификации нерелятивистских преобразований, которую мы обсуждали ранее в разделе 2.1. Остановимся здесь лишь на существующих различиях. В отличие от матрицы трехмерных вращений, матрица четырехмерных вращений $a_{\mu\nu}$ не является унитарной, поскольку лишь элементы a_{ij} (где $i, j = 1, 2, 3$) и a_{44} являются дей-

ствительными. Элементы a_{i4} и a_{4i} являются мнимыми. В самом деле, взяв детерминант от обеих частей равенства (3.2), получаем

$$(\text{Det}(a))^2 = 1.$$

Следовательно,

$$\text{Det}(a) = \pm 1.$$

Воспользовавшись строкой $\nu = 4$ и $\lambda = 4$ равенства (3.2), получаем

$$a_{\mu 4} a_{\mu 4} = 1,$$

следовательно,

$$a_{44}^2 = 1 - a_{i4} a_{i4} = 1 + \text{Im}(a_{i4}) \text{Im}(a_{i4}).$$

Отсюда следует, что

$$a_{44} = \pm \sqrt{1 + \text{Im}(a_{i4}) \text{Im}(a_{i4})}.$$

Поэтому либо $a_{44} \geq 1$, либо $a_{44} \leq -1$. Преобразования с $a_{44} \geq 1$ образуют подгруппу общей группы преобразований Лоренца.

Преобразования трех- и четырехмерных вращений и преобразования пространственного и временного сдвига являются непрерывными, поскольку они могут быть получены из тождественного преобразования $x'_\mu = \delta_{\mu\nu} x_\nu$ путем непрерывного изменения недиагональных элементов матрицы $a_{\mu\nu}$ или 4-вектора b_μ . Подгруппу группы Лоренца с $\text{Det}(a) = 1$ и $a_{44} \geq 1$ называют собственной ортохронной группой Лоренца. Поскольку путем непрерывного изменения параметров преобразования нельзя изменить знак $\text{Det}(a)$ или a_{44} , то любое преобразование Лоренца, получающееся из тождественного непрерывным изменением параметров, также является собственным ортохронным.

Любое преобразование четырехмерной системы отсчета является либо собственным ортохронным, либо представляет собой произведение элемента группы собственных ортохронных преобразований и одного из дискретных преобразований. Таким образом, полная группа преобразований Лоренца с необходимостью включает дискретные преобразования, каковыми являются преобразования пространственной инверсии

$$P = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и обращения времени

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

Произвольное преобразование, принадлежащее группе Лоренца, является либо собственным ортохронным преобразованием, либо может быть представлено как произведение: aP , aT или aPT .

3.2. Скалярные поля

Так же как и в нерелятивистском случае, любому преобразованию координат мы можем поставить в соответствие следующее преобразование скалярной волновой функции:

$$\psi(x') = W(a, b)\psi(x),$$

где a является теперь матрицей четырехмерных преобразований, а 4-вектор b по-прежнему описывает пространственно-временные трансляции. При анализе свойств симметрии непрерывных преобразований удобно рассмотреть сначала инфинитезимальные преобразования, т. е. преобразования бесконечно близкие к тождественному.

3.2.1. Пространственно-временные сдвиги и вращения.

Четырехмерная трансляция замкнутой системы частиц или отдельной свободной частицы не меняет ее энергии, поскольку пространство и время однородны. Генератором преобразования четырехмерной трансляции является оператор 4-импульса частицы. Инфинитезимальное преобразование четырехмерной трансляции имеет вид

$$\psi(x') = \psi(x - \Delta x) = \psi(x) - \Delta x_\mu \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_\mu} + \dots = \left(1 - i \Delta x_\mu \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right) \right) \psi(x).$$

Следовательно, оператор 4-импульса имеет вид

$$p_\mu = -i \frac{\partial}{\partial x_\mu}. \quad (3.3)$$

Этот оператор совпадает с оператором 4-импульса нерелятивистской теории и потому обладает теми же коммутационными свойствами:

$$[x_\mu, p_\nu] = i \delta_{\mu\nu}, \quad (3.4)$$

$$[p_\mu, p_\nu] = 0. \quad (3.5)$$

Матрица трехмерных вращений системы координат a_R становится теперь четырехрядной и, например, в случае вращения системы отсчета вокруг пространственной оси z имеет вид

$$a_R^{(3)} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрица четырехмерных вращений соответствует преобразованию Лоренца в системе координат, движущейся со скоростью \mathbf{v} относительно

начальной системы. Например, в случае когда движение происходит вдоль оси x , матрица a_L имеет вид

$$a_L^{(1)} = \begin{pmatrix} \cos \chi & 0 & 0 & \sin \chi \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sin \chi & 0 & 0 & \cos \chi \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

где

$$\operatorname{tg} \chi = i \frac{v}{c}.$$

Действительно, преобразование Лоренца имеет в этом случае вид

$$x'_1 = x_1 \cos \chi + x_4 \sin \chi = \frac{x_1 + i \frac{v}{c} x_4}{\sqrt{1 - (v/c)^2}},$$

$$x'_4 = -x_1 \sin \chi + x_4 \cos \chi = \frac{x_4 - i \frac{v}{c} x_1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$$

или

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad t' = \frac{t - \frac{v}{c^2} x}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}.$$

С учетом вышеприведенных соотношений матрицу инфинитезимальных преобразований трех- и четырехмерных вращений можно записать в виде

$$a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu}, \quad (3.7)$$

где

$$\varepsilon_{ij} = e_{ijk} \delta\theta_k, \quad \varepsilon_{i4} = i \frac{\delta v_i}{c}, \quad \varepsilon_{4i} = -i \frac{\delta v_i}{c}. \quad (3.8)$$

Здесь, как и ранее, используются два соглашения: 1) для нумерации компонент четырехмерных векторов используются греческие буквы, а компоненты трехмерных векторов нумеруются латинскими буквами; 2) по повторяющемуся индексу производится суммирование.

Закон преобразования волновой функции при трех- и четырехмерных вращениях системы координат определяется следующим соотношением:

$$\begin{aligned} \psi(x + \Delta x) &= \psi(x) + \Delta x_\mu \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_\mu} = \\ &= \left[1 + i \delta\theta_i \left(i e_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \right) + i \frac{\delta v_i}{c} \left(x_4 \frac{\partial}{\partial x_i} - x_i \frac{\partial}{\partial x_4} \right) \right] \psi(x). \end{aligned}$$

В соответствии с принятыми выше определениями, оператор углового момента связан не с поворотом системы отсчета, а с поворотом всех частиц замкнутой системы, следовательно, в последней формуле мы должны произвести замену $\delta\theta \rightarrow -\delta\theta$. Аналогично, оператор четырехмерных вращений связан с переходом к системе отсчета $t' = t - \Delta t$,

поэтому в последней формуле мы должны произвести замену $\delta v \rightarrow -\delta v$. С учетом указанных определений получаем

$$\psi(x') = \left[1 + i\delta\mathbf{l} + i\frac{\delta\mathbf{v}}{c}\mathbf{k} \right] \psi(x). \quad (3.9)$$

Мы видим, что наряду с оператором углового момента \mathbf{l} , являющимся генератором преобразования трехмерных вращений,

$$\begin{aligned} l_1 &= -i \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ l_2 &= -i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ l_3 &= -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \end{aligned} \quad (3.10)$$

в выражении (3.9) появляется новый оператор \mathbf{k} , являющийся генератором преобразования четырехмерных вращений. Компоненты этого векторного оператора имеют вид

$$\begin{aligned} k_1 &= x \frac{\partial}{\partial x_4} - x_4 \frac{\partial}{\partial x} = -i \left(\frac{x}{c} \frac{\partial}{\partial t} + ct \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ k_2 &= y \frac{\partial}{\partial x_4} - x_4 \frac{\partial}{\partial y} = -i \left(\frac{y}{c} \frac{\partial}{\partial t} + ct \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ k_3 &= z \frac{\partial}{\partial x_4} - x_4 \frac{\partial}{\partial z} = -i \left(\frac{z}{c} \frac{\partial}{\partial t} + ct \frac{\partial}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Операторы \mathbf{l} и \mathbf{k} обладают следующими коммутационными соотношениями:

$$[l_i, x_j] = ie_{ijk}x_k, \quad (3.12)$$

$$[k_i, x_j] = -x_4\delta_{ij}, \quad (3.13)$$

$$[l_i, x_4] = 0, \quad (3.14)$$

$$[k_i, x_4] = x_i, \quad (3.15)$$

$$[l_i, p_j] = ie_{ijk}p_k, \quad (3.16)$$

$$[k_i, p_j] = -p_4\delta_{ij}, \quad (3.17)$$

$$[l_i, p_4] = [p_i, p_4] = 0, \quad (3.18)$$

$$[k_i, p_4] = p_i, \quad (3.19)$$

$$[l_i, l_j] = ie_{ijk}l_k, \quad (3.20)$$

$$[k_i, k_j] = -ie_{ijk}l_k, \quad (3.21)$$

$$[l_i, k_j] = ie_{ijk}k_k. \quad (3.22)$$

Из (3.12)–(3.15) следует, что в отличие от оператора углового момента \mathbf{l} , который не коммутирует лишь с пространственными компонентами 4-вектора x_μ , оператор \mathbf{k} не коммутирует со всеми его компонентами. Следовательно, так же как и в нерелятивистском случае, функция Лагранжа свободной частицы в релятивистской теории не

может явно зависеть от компонент 4-вектора x_μ , иначе он перестает быть инвариантным относительно преобразований Лоренца.

Из (3.16) и (3.17) следует, что оба оператора, \mathbf{l} и \mathbf{k} , не коммутируют с пространственной компонентой оператора 4-импульса. Таким образом, учитывая обсуждения, приведенные в разделе 2.2.2, функция Лагранжа свободной частицы, описываемой скалярной волновой функцией, и в релятивистском случае не может быть линейной формой оператора импульса \mathbf{p} .

В отличие от оператора \mathbf{l} , оператор \mathbf{k} не коммутирует также и с оператором p_4 . Это означает, что функция Лагранжа свободной частицы, описываемой скалярной волновой функцией, в релятивистском случае не может быть линейной формой оператора p_4 , поскольку в этом случае она теряет свойство инвариантности относительно преобразований четырехмерных вращений.

Как видно из (3.20) и (3.21), компоненты оператора \mathbf{k} , так же как и компоненты оператора углового момента \mathbf{l} , не коммутируют друг с другом. Однако эти два оператора имеют существенные различия. Действительно, разность двух последовательных пространственных поворотов и тех же поворотов, совершенных в обратном порядке, эквивалентна пространственному же повороту вокруг третьей оси, $l_1 l_2 - l_2 l_1 = i l_3$, следовательно, операции трехмерных поворотов не выводят состояние частицы из гиперплоскости $t = \text{const}$. С другой стороны, разность двух четырехмерных вращений, произведенных в двух пространственно-временных плоскостях, и тех же вращений, совершенных в обратном порядке, эквивалентна трехмерному повороту, поскольку $k_1 k_2 - k_2 k_1 = -i l_3$, следовательно, компоненты вектора наблюдаемой величины, соответствующей вектору \mathbf{k} , не могут меняться произвольным образом и существенно зависят от углового момента состояния частицы.

Из (3.22) видно, что операторы \mathbf{l} и \mathbf{k} не коммутируют друг с другом. Это и понятно, поскольку, как мы только что отмечали, четырехмерные повороты связаны с трехмерными.

3.2.2. Уравнение Клейна–Гордона–Фока. В предыдущей главе мы видели, что оператор углового момента \mathbf{l} и оператор квадрата углового момента \mathbf{l}^2 коммутируют с оператором $p_i p_i$. Учитывая коммутационные соотношения (3.18), несложно видеть, что оба указанных оператора коммутируют также с оператором квадрата величины 4-импульса $p_\mu p_\mu$:

$$[\mathbf{l}, p_\mu p_\mu] = 0, \quad [\mathbf{l}^2, p_\mu p_\mu] = 0. \quad (3.23)$$

Определим коммутационные соотношения оператора \mathbf{k} с оператором квадрата величины 4-импульса. Используя формулы (3.17) и (3.19),

получаем

$$\begin{aligned} [k_1, p_1^2] &= 2p_1 p_4, \\ [k_1, p_2^2] &= 0, \\ [k_1, p_3^2] &= 0, \\ [k_1, p_4^2] &= -2p_1 p_4. \end{aligned}$$

Складывая эти равенства, получаем

$$[k_1, p_\mu p_\mu] = 0.$$

Таким образом, несложно видеть, что оператор \mathbf{k} коммутирует с оператором квадрата величины 4-импульса:

$$[\mathbf{k}, p_\mu p_\mu] = 0. \quad (3.24)$$

Из приведенных коммутационных соотношений видно, что свойства оператора \mathbf{k} близки к свойствам оператора углового момента. Введем поэтому оператор квадрата вектора \mathbf{k} :

$$\mathbf{k}^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2.$$

Из формулы (3.24) следует очевидное коммутационное соотношение

$$[\mathbf{k}^2, p_\mu p_\mu] = 0. \quad (3.25)$$

Из коммутационных соотношений (3.21) видно, что, в отличие от оператора квадрата углового момента, оператор квадрата вектора \mathbf{k}^2 не коммутирует с операторами его проекций k_1, k_2, k_3 . Действительно,

$$\begin{aligned} [k_1^2, k_1] &= 0, \\ [k_2^2, k_1] &= -i(k_2 l_3 + l_3 k_2), \\ [k_3^2, k_1] &= i(k_3 l_2 + l_2 k_3). \end{aligned}$$

С другой стороны, из коммутационных соотношений (3.22) видно, что оператор \mathbf{k}^2 коммутирует с оператором углового момента. Используя (3.22), получаем

$$\begin{aligned} [k_1^2, l_1] &= 0, \\ [k_2^2, l_1] &= -i(k_2 k_3 + k_3 k_2), \\ [k_3^2, l_1] &= i(k_3 k_2 + k_2 k_3). \end{aligned}$$

Складывая получившиеся равенства, получаем

$$[\mathbf{k}^2, l_1] = 0.$$

Проводя аналогичную процедуру с остальными проекциями углового момента, окончательно получаем

$$[\mathbf{k}^2, l_1] = 0, \quad [\mathbf{k}^2, l_2] = 0, \quad [\mathbf{k}^2, l_3] = 0. \quad (3.26)$$

Приведенные выше коммутационные соотношения показывают, что релятивистски инвариантный лагранжиан для частицы, описываемой скалярной волновой функцией, должен быть квадратичной формой всех компонент оператора p_μ . Действительно, как следует из коммутационных соотношений (3.16)–(3.18), операторы \mathbf{l}^2 и \mathbf{k}^2 не коммутируют с пространственными компонентами оператора 4-импульса p_μ , а оператор \mathbf{k}^2 не коммутирует и с временной компонентой оператора 4-импульса. Таким образом, в релятивистском случае функция Лагранжа свободного скалярного материального поля принимает вид

$$L = -\frac{1}{2m_0} \left[\hbar^2 \frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu} \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right]. \quad (3.27)$$

Отметим, что ранее мы полагали $\hbar = 1$, а последняя формула записана в размерном виде. Вариация (3.27) по ψ^* приводит к уравнению Клейна–Гордона–Фока (КГФ)

$$\frac{1}{2m_0} (p_\mu p_\mu + m_0^2 c^2) \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.28)$$

Размерный множитель в (3.27) выбран таким образом, чтобы уравнение (3.28) переходило в уравнение Шредингера, а функция Гамильтона имела размерность энергии.

Действительно, представим волновую функцию уравнения (3.28) в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_S(\mathbf{r}, t) \exp(-im_0 c^2 t / \hbar). \quad (3.29)$$

В нерелятивистском пределе выполняется следующее неравенство:

$$\left| \frac{\partial \psi_S}{\partial t} \right| \ll \frac{m_0 c^2}{\hbar} |\psi_S|. \quad (3.30)$$

Подставляя волновую функцию (3.29) в (3.28) и пользуясь неравенством (3.30), получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0} (p_\mu p_\mu + m_0^2 c^2) \psi_S \exp(-im_0 c^2 t / \hbar) = \\ = \exp(-im_0 c^2 t / \hbar) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi_S. \end{aligned}$$

Таким образом, в нерелятивистском пределе волновое уравнение принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi_S}{\partial t} = H_S \psi_S,$$

где H_S — нерелятивистский гамильтониан свободной частицы:

$$H_S = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta.$$

Далее, используя лагранжиан (3.27), получаем следующие выражения для обобщенных импульсов, сопряженных обобщенным координатам полей ψ^* и ψ :

$$\pi^* = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \frac{\hbar^2}{2m_0 c^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}, \quad \pi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}^*} = \frac{\hbar^2}{2m_0 c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Отсюда для функции Гамильтона свободной частицы получаем

$$H = \pi^* \dot{\psi} + \dot{\psi}^* \pi - L = \frac{1}{2m_0} \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \hbar^2 \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right]. \quad (3.31)$$

Несложно видеть, что функция Гамильтона имеет размерность энергии, однако к интерпретации физического смысла выражения (3.31) мы перейдем в следующей главе, после того как обсудим специфику нормировки волновых функций уравнения КГФ.

3.2.3. Неприводимые представления однородной группы Лоренца. Обратимся к коммутационным соотношениям (3.20)–(3.22):

$$\begin{aligned} [l_i, l_j] &= i e_{ijk} l_k, \\ [k_i, k_j] &= -i e_{ijk} l_k, \\ [l_i, k_j] &= i e_{ijk} k_k. \end{aligned}$$

Введем вместо операторов \mathbf{l} и \mathbf{k} новые операторы

$$\mathbf{a} = \mathbf{l} + i\mathbf{k}, \quad (3.32)$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{l} - i\mathbf{k}. \quad (3.33)$$

Коммутационные соотношения операторов \mathbf{a} и \mathbf{b} имеют вид

$$[a_i, a_j] = i e_{ijk} a_k, \quad (3.34)$$

$$[b_i, b_j] = i e_{ijk} b_k, \quad (3.35)$$

$$[a_i, b_j] = 0. \quad (3.36)$$

Несложно видеть, что операторы \mathbf{a} и \mathbf{b} соответствуют двум независимым угловым моментам, т. е. алгебра однородной группы Лоренца эквивалентна прямой сумме двух алгебр $SU(2)$. Если a — величина первого углового момента, а b — второго, то представление (3.32)–(3.33) задается парой чисел (a, b) . Размерность представления равна $(2a + 1)(2b + 1)$.

Учитывая определение операторов \mathbf{l} и \mathbf{k} , несложно видеть, что операторы \mathbf{a} и \mathbf{b} имеют смысл угловых моментов вращения в четырехмерном пространстве. При этом оператор \mathbf{l} благодаря связи (2.30) фигурирует уже в уравнении для свободной частицы, а оператор \mathbf{k} в уравнении движения свободной частицы не фигурирует. Это и понятно, поскольку, как следует из приведенного выше обсуждения, оператор \mathbf{k} связан с поступательным ускоренным движением, т. е. с изменением кинетической энергии движения частицы, в то время как энергия свободной частицы остается неизменной. Более подробно на интерпретации опе-

ратора \mathbf{k} мы остановимся позже, после того как проведем анализ задач взаимодействия частиц с внешним электромагнитным полем. Однако забегаая вперед, можно отметить, что предварительное представление о физическом смысле этого оператора дает соотношение (3.15). Как известно, квантово-механическое среднее оператора $\hat{\mathbf{d}} = q_0 \mathbf{r}$ определяет электрический дипольный момент частицы. Электрический дипольный момент равен нулю в стационарных состояниях частицы, взаимодействующей со сферически симметричным внешним полем, и отличен от нуля в нестационарном случае.

3.2.4. Действие для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем. Функция Лагранжа частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, является суммой функции Лагранжа свободного электромагнитного поля (2.37) и функции Лагранжа свободной частицы (3.27), в которой нужно произвести каноническую подстановку (2.38). Таким образом, действие частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, определяется выражением

$$S = \frac{1}{8\pi} \int \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right)^2 - (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] dV dt - \frac{1}{2m_0} \int \left[\left(i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu} - \frac{q_0}{c} A_\mu \psi^* \right) \times \right. \\ \left. \times \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \frac{q_0}{c} A_\mu \psi \right) + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right] dV dt. \quad (3.37)$$

Варьируя действие (3.37) по ψ^* , получаем

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu \right) \left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu \right) + m_0^2 c^2 \right] \psi(x) = 0. \quad (3.38)$$

Варьируя действие по 4-потенциалу электромагнитного поля, получаем

$$\nabla_\nu \nabla_\nu A_\mu - \nabla_\mu \nabla_\nu A_\nu = -\frac{4\pi}{c} j_\mu, \quad (3.39)$$

где компоненты 4-вектора плотности тока $j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho)$ имеют вид

$$\mathbf{j}(x) = \frac{q_0}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \psi^* \cdot \psi - \psi^* \nabla \psi) - \frac{q_0}{c} \psi^* \mathbf{A} \psi \right], \quad (3.40)$$

$$\rho(x) = \frac{q_0}{m_0 c} \left[-\frac{i\hbar}{2c} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - \frac{q_0}{c} \psi^* \varphi \psi \right]. \quad (3.41)$$

4-вектор плотности тока удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} = 0. \quad (3.42)$$

Мы видим, что, в отличие от нерелятивистских уравнений, плотность заряда в релятивистском случае зависит от временной производной волновой функции. Это вполне понятно, поскольку волновое уравнение является уравнением второго порядка по времени, поэтому для однозначного определения решения уравнения мы должны задавать в начальный момент как волновую функцию $\psi(\mathbf{r}, 0)$, так и ее производную $\partial \psi(\mathbf{r}, 0) / \partial t$. Зависимость плотности заряда от временной

производной волновой функции приводит к тому, что плотность заряда перестает быть положительно определенной величиной. Именно эта черта релятивистских волновых уравнений со второй производной по времени приводит к тому, что пространство состояний материальных полей, описываемых такими уравнениями, существенно расширяется по сравнению с пространством состояний любых материальных уравнений, включающих лишь первую производную по времени. Анализ физики явлений, в которых $\rho(\mathbf{r}, t)$ имеет различный знак в различных пространственных точках, является одной из основных целей настоящей книги. Забегая вперед, отметим, что изменение знака ρ может происходить лишь во внешних полях очень высокой напряженности. Необходимые для этого условия будут сформулированы уже в следующей главе.

Используя лагранжиан уравнения (3.37), получаем следующие выражения для обобщенных импульсов, сопряженных обобщенным координатам полей \mathbf{A} , ψ^* и ψ :

$$\begin{aligned}\mathbf{\Pi} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{A}}} = \frac{1}{4\pi c} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right), \\ \pi^* &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \frac{\hbar}{2m_0 c} \left(\frac{\hbar}{c} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - i \frac{q_0}{c} \varphi \psi^* \right), \\ \pi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}^*} = \frac{\hbar}{2m_0 c} \left(\frac{\hbar}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + i \frac{q_0}{c} \varphi \psi \right).\end{aligned}\quad (3.43)$$

Отсюда для функции Гамильтона получаем

$$\begin{aligned}H &= \mathbf{\Pi} \dot{\mathbf{A}} + \pi^* \dot{\psi} + \dot{\psi}^* \pi - L = \\ &= \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi)^2 + (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] + \frac{1}{2m_0} \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{q_0^2}{c^2} \varphi^2 \psi^* \psi + \right. \\ &\quad \left. + \left(i\hbar \nabla \psi^* - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi^* \right) \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi \right) + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right].\end{aligned}\quad (3.44)$$

Первое слагаемое в правой части (3.44) определяет энергию поля, а второе — энергию частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле. Воспользуемся равенством

$$\begin{aligned}\int \left(i\hbar \nabla \psi^* - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi^* \right) \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi \right) dV = \\ = \frac{1}{2} \int \left[\left(i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi^* \cdot \psi + \psi^* \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi \right] dV.\end{aligned}$$

Используя теперь уравнение (3.38) и уравнение для комплексно сопряженной волновой функции, после несложных преобразований для энергии частицы во внешнем поле получаем следующее выражение:

$$E = \frac{1}{m_0} \int \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{1}{4} \frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} \right) + \frac{i\hbar}{2c^2} q_0 \varphi \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] dV.\quad (3.45)$$

В стационарном состоянии с волновой функцией

$$\psi(\mathbf{r}, t) = u_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad (3.46)$$

выражение для энергии частицы во внешнем поле принимает вид

$$E = \frac{E_n}{m_0 c^2} \int u_n^*(\mathbf{r}) (E_n - q_0 \varphi(\mathbf{r})) u_n(\mathbf{r}) dV. \quad (3.47)$$

Краевые задачи для уравнений, включающих вторую производную по времени, являются квадратичными формами собственных значений E_n , поэтому в общем случае собственные значения являются двузначными.

Например, для свободной частицы получаем: $E_{\mathbf{p}} = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$. Условие нормировки волновых функций, являющееся следствием уравнения непрерывности (3.42), с учетом двузначности собственных значений принимает вид

$$\int \rho_n(\mathbf{r}) dV = \pm q_0. \quad (3.48)$$

Используя условие нормировки, для энергии частицы в состоянии с волновой функцией (3.46) получаем

$$E = \pm E_n.$$

Такое соотношение между энергией частицы и собственными значениями E_n также является одной из фундаментальных черт волновых материальных уравнений со второй производной по времени, которая и лежит в основе непротиворечивой и последовательной интерпретации специфики математического аппарата указанных уравнений.

3.3. Спинорные поля

Обобщая результаты рассмотрения, приведенного в гл. 2 и в предыдущих разделах настоящей главы, мы получим здесь выражение для действия релятивистской спинорной частицы.

3.3.1. Биспиноры. Введение собственного углового момента, или спина, частицы в рамках нерелятивистских теорий, как было показано выше, производится на основе аналогии между собственным угловым моментом частицы и угловым моментом вращательного движения частицы во внешнем поле. Поскольку волновая функция частицы с угловым моментом l имеет $(2l + 1)$ компонент, отличающихся по величине проекции углового момента $-l \leq m \leq l$, то частице со спином s ставится в соответствие многокомпонентная волновая функция с числом компонент $(2s + 1)$. Такое число компонент реализует неприводимое представление группы трехмерных вращений. При переходе к релятивистским теориям указанная аналогия становится неполной, поскольку в релятивистском случае трехмерные вращения системы координат являются подгруппой общей группы четырехмерных вращений системы

координат. Следовательно, структура волновой функции частицы с полупелым спином должна быть согласована с группой четырехмерных вращений. В результате волновая функция частицы со спином $1/2$ в релятивистской квантовой механике становится четырехкомпонентной.

Обратимся вновь к свойствам матрицы преобразования спиноров

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

обсуждавшимся в разделе 2.3.1. Матрица четырехмерных вращений, так же как и матрица трехмерных вращений, должна быть унимодулярна:

$$ad - bc = 1. \quad (3.49)$$

При условии (3.49) матрица U , зависящая от четырех комплексных чисел, содержит шесть независимых действительных параметров — ровно столько, сколько необходимо для задания трех действительных углов поворота в пространственных плоскостях и трех мнимых углов поворота в пространственно-временных плоскостях.

При одном лишь условии (3.49) преобразования спинора,

$$\begin{aligned} \xi'_1 &= a\xi_1 + b\xi_2, \\ \xi'_2 &= c\xi_1 + d\xi_2, \end{aligned} \quad (3.50)$$

и комплексно сопряженного спинора,

$$\begin{aligned} \eta_1^{*'} &= a^*\eta_1^* + b^*\eta_2^*, \\ \eta_2^{*'} &= c^*\eta_1^* + d^*\eta_2^*, \end{aligned} \quad (3.51)$$

становятся линейно независимыми.

Два спинора, ξ и η^* , имеют в сумме четыре независимые компоненты, совпадающие с числом компонент 4-вектора. Таким образом, образуя волновую функцию из спинора и комплексно сопряженного спинора, мы получаем биспинорную четырехкомпонентную волновую функцию

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (3.52)$$

где φ — спинор, преобразующийся согласно правилам (3.50), а χ — спинор, преобразующийся согласно с правилами преобразования комплексно сопряженного спинора (3.51). Отметим, что в общем случае спиноры φ и χ могут быть линейно независимыми комбинациями двух спиноров указанного типа.

При преобразованиях, соответствующих однородной группе Лоренца, биспинорная волновая функция принимает вид

$$\Psi' = \begin{pmatrix} \varphi' \\ \chi' \end{pmatrix} = U(a, 0)\Psi = U(a, 0) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3.53)$$

Поскольку Ψ является четырехкомпонентным вектором, то матрица преобразования U имеет размерность 4×4 . Существует 16 линей-

но независимых (4×4) -матриц, которые могут быть составлены из четырех матриц γ_μ , удовлетворяющих следующим коммутационным соотношениям:

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (3.54)$$

В качестве линейно независимых матриц можно выбрать следующие:

а) единичная матрица

$$I = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad (3.55)$$

где I — единичная (2×2) -матрица;

б) четыре матрицы γ_μ , которые в стандартном представлении имеют вид

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -i\boldsymbol{\sigma} \\ i\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ — матрицы Паули;

в) шесть компонент антисимметричного 4-тензора

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu); \quad (3.57)$$

г) одна матрица

$$\gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4; \quad (3.58)$$

д) четыре матрицы

$$\gamma_5 \gamma_\mu. \quad (3.59)$$

Отметим, что матрица γ_5 связана с антисимметризованным произведением четырех матриц γ_μ :

$$e_{\mu\nu\rho\sigma} \gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\rho \gamma_\sigma,$$

пропорциональным полностью антисимметричному тензору четвертого ранга $e_{\mu\nu\rho\sigma}$. В свою очередь матрицы (3.59) связаны с антисимметризованным произведением трех матриц:

$$e_{\mu\nu\rho} \gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\rho.$$

Как видим, полный набор (4×4) -матриц составляют единичная матрица, четыре матрицы γ_μ и антисимметричные 4-тензоры второго, третьего и четвертого ранга, составленные из произведений матриц γ_μ .

3.3.2. Спинорное представление однородной группы Лоренца.

Матрица преобразований однородной группы Лоренца зависит от шести линейно независимых параметров, поэтому нам нужно выбрать шесть из указанных шестнадцати линейно независимых матриц. Проще всего сделать этот выбор, основываясь на связи тензорного и спинорного представлений однородной группы преобразований Лоренца. Указанная связь, применительно к представлениям группы трехмерных вращений, рассматривалась нами ранее в разделе 2.3.6.

Преобразования скалярной волновой функции при трех- и четырехмерных вращениях системы координат были рассмотрены нами в разделе 3.2.1. Инфинитезимальное преобразование волновой функции (3.9) можно переписать в следующем виде:

$$\psi(x + \Delta x) = T(\varepsilon, 0)\psi(x) = \left(1 + \frac{i}{2}\varepsilon_{\mu\nu}J_{\nu\mu}\right)\psi(x), \quad (3.60)$$

где

$$\varepsilon_{ij} = -e_{ijk}\delta\theta_k, \quad \varepsilon_{4i} = i\frac{\delta v_i}{c}, \quad (3.61)$$

$$J_{\mu\nu} = -i\left(x_\mu\frac{\partial}{\partial x_\nu} - x_\nu\frac{\partial}{\partial x_\mu}\right). \quad (3.62)$$

Несложно видеть, что пространственные компоненты антисимметричного тензора $J_{\mu\nu}$ совпадают с оператором углового момента:

$$J_{ij} = -i\left(x_i\frac{\partial}{\partial x_j} - x_j\frac{\partial}{\partial x_i}\right) = L_{ij} = e_{ijk}l_k, \quad (3.63)$$

а пространственно-временные компоненты связаны с оператором \mathbf{k} :

$$J_{4i} = -i\left(x_4\frac{\partial}{\partial x_i} - x_i\frac{\partial}{\partial x_4}\right) = ik_i. \quad (3.64)$$

Оператор $J_{\mu\nu}$ обладает следующими коммутационными свойствами:

$$i[J_{\mu\nu}, J_{\rho\sigma}] = J_{\mu\sigma}\delta_{\nu\rho} - J_{\nu\sigma}\delta_{\mu\rho} + J_{\nu\rho}\delta_{\mu\sigma} - J_{\mu\rho}\delta_{\nu\sigma}. \quad (3.65)$$

По аналогии с трехмерным случаем, рассмотренным в разделе 2.3.6, введем спиновый оператор

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -\frac{i}{4}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu), \quad (3.66)$$

который является антисимметричным тензором второго ранга, построенным из матриц γ_μ , удовлетворяющих коммутационным соотношениям (3.54). Тогда матрица инфинитезимального преобразования $U(\varepsilon, 0)$ примет вид

$$U(\varepsilon, 0) = I + \frac{i}{2}\varepsilon_{\mu\nu}J_{\nu\mu}^{(\gamma)}, \quad (3.67)$$

если спиновый оператор (3.66) удовлетворяет коммутационным соотношениям (3.65).

Используя коммутационные соотношения (3.54), получаем

$$[J_{\mu\nu}^{(\gamma)}, \gamma_\rho] = -i\gamma_\mu\delta_{\nu\rho} + i\gamma_\nu\delta_{\mu\rho},$$

откуда следует

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)}\gamma_\rho - \gamma_\rho J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -i\gamma_\mu\delta_{\nu\rho} + i\gamma_\nu\delta_{\mu\rho}, \quad (3.68)$$

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)}\gamma_\sigma - \gamma_\sigma J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -i\gamma_\mu\delta_{\nu\sigma} + i\gamma_\nu\delta_{\mu\sigma}. \quad (3.69)$$

Умножая обе стороны равенства (3.68) справа на γ_σ , а равенства (3.69) — слева на γ_ρ и складывая получившиеся равенства, в результате получаем

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)}\gamma_\rho\gamma_\sigma - \gamma_\rho\gamma_\sigma J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -i\gamma_\mu\gamma_\sigma\delta_{\nu\rho} + i\gamma_\nu\gamma_\sigma\delta_{\mu\rho} - i\gamma_\rho\gamma_\mu\delta_{\nu\sigma} + i\gamma_\rho\gamma_\nu\delta_{\mu\sigma}.$$

После простейших преобразований окончательно имеем

$$i[J_{\mu\nu}^{(\gamma)}, J_{\rho\sigma}^{(\gamma)}] = J_{\mu\sigma}^{(\gamma)}\delta_{\nu\rho} - J_{\nu\sigma}^{(\gamma)}\delta_{\mu\rho} + J_{\nu\rho}^{(\gamma)}\delta_{\mu\sigma} - J_{\mu\rho}^{(\gamma)}\delta_{\nu\sigma}. \quad (3.70)$$

Таким образом, мы видим, что коммутационные соотношения спинового оператора $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ совпадают с требуемыми коммутационными соотношениями (3.65). Следовательно, матрица инфинитезимального преобразования биспинорной волновой функции имеет вид

$$U(\varepsilon, 0) = I + \frac{1}{8}\varepsilon_{\mu\nu}(\gamma_\nu\gamma_\mu - \gamma_\mu\gamma_\nu). \quad (3.71)$$

Итак, генератором преобразования трех- и четырехмерных вращений биспинорной волновой функции является антисимметричный тензор второго ранга, составленный из матриц γ_μ .

3.3.3. Трех- и четырехмерные вращения. В стандартном представлении матриц γ_μ , определяемом формулами (3.51), для матрицы инфинитезимальных трехмерных вращений U_R и матрицы преобразования Лоренца U_L из (3.71), с учетом формул (3.61) и (3.66), получаем следующие выражения:

$$U_R(\delta\theta) = I + \frac{i}{2}\delta\theta\Sigma, \quad (3.72)$$

$$U_L(\delta\mathbf{v}) = I - \frac{1}{2}\frac{\delta\mathbf{v}}{c}\boldsymbol{\alpha}, \quad (3.73)$$

где матрицы Σ и $\boldsymbol{\alpha}$ имеют вид

$$\Sigma = \frac{1}{2}[\boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{\gamma}] = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (3.74)$$

$$\boldsymbol{\alpha} = i\gamma_4\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.75)$$

Поскольку матрица Σ является генератором группы трехмерных вращений, то она соответствует оператору спина, т.е. оператору собственного углового момента частицы, описываемой биспинорной волновой функцией. Физический смысл оператора $\boldsymbol{\alpha}$ мы обсудим несколько позже.

Учитывая аддитивность поворотов, с помощью равенства

$$U(\theta) = \left[U\left(\frac{\theta}{N}\right) \right]^N$$

несложно получить выражения для матриц поворотов на конечные углы:

$$U_R(\boldsymbol{\theta}) = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\mathbf{n}\boldsymbol{\Sigma}\right), \quad (3.76)$$

$$U_L(\mathbf{v}) = \exp\left(-\frac{1}{2}\operatorname{arcth}\left(\frac{v}{c}\right)\mathbf{n}\boldsymbol{\alpha}\right). \quad (3.77)$$

Матрицы Σ_i и α_i обладают следующими свойствами:

$$\Sigma_i^2 = I, \quad \alpha_i^2 = I, \quad (3.78)$$

следовательно,

$$\Sigma_i^{2n} = I, \quad \Sigma_i^{2n+1} = \Sigma_i, \quad \alpha_i^{2n} = I, \quad \alpha_i^{2n+1} = \alpha_i, \quad (3.79)$$

где n — целое положительное число. С учетом последних выражений формулы (3.76) и (3.77) можно переписать в виде

$$U_R(\boldsymbol{\theta}) = \cos\frac{\theta}{2} + i(\mathbf{n}\boldsymbol{\Sigma})\sin\frac{\theta}{2}, \quad (3.80)$$

$$U_L(\mathbf{v}) = \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}\operatorname{arcth}\frac{v}{c}\right) - (\mathbf{n}\boldsymbol{\alpha})\operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}\operatorname{arcth}\frac{v}{c}\right). \quad (3.81)$$

Представление (3.71) однородной группы Лоренца не является унитарным. Действительно, учитывая, что матрицы $\boldsymbol{\Sigma}$ и $\boldsymbol{\alpha}$ являются эрмитовыми: $\boldsymbol{\Sigma}^+ = \boldsymbol{\Sigma}$ и $\boldsymbol{\alpha}^+ = \boldsymbol{\alpha}$, несложно видеть, что в стандартном представлении матриц γ_μ

$$U_R^+ = U_R^{-1}, \quad U_L^+ \neq U_L^{-1}. \quad (3.82)$$

Указанные соотношения выполняются и в произвольном представлении эрмитовых матриц γ_μ . Действительно, $(\gamma_i\gamma_j)^+ = \gamma_j\gamma_i = -\gamma_i\gamma_j$ и $(i\gamma_4\gamma_i)^+ = -i\gamma_i\gamma_4 = i\gamma_4\gamma_i$.

Матрица вращения на угол $\theta = 2\pi$ равна $U_R(2\pi) = -I$. Поскольку поворот на 2π возвращает координатные оси в исходное положение, то мы видим, что биспинорная волновая функция определена с точностью до знака.

3.3.4. Действие для релятивистской частицы с полуцелым спином. Действие (3.37) для бесспиновой частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, было получено с использованием канонической подстановки $p_\mu \rightarrow p_\mu - \frac{q}{c}A_\mu$. Указанная подстановка учитывает взаимодействие трансляционных степеней свободы частицы с внешним полем. Частица, обладающая спином, наряду с трансляционными степенями свободы имеет внутренние степени свободы, определяющие ориентацию ее спина. Гамильтониан свободной частицы не зависит от направления спина, поскольку свободное пространство однородно. Электромагнитное поле нарушает как трансляционную, так и ориентационную изотропию пространства. Взаимодействие спиновых степеней свободы частицы с электромагнитным полем описывается оператором (3.66), являющимся генератором однородной группы Лоренца.

Поскольку оператор $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ является антисимметричным тензором, то ясно, что ориентационный гамильтониан взаимодействия является произведением $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ и антисимметричного тензора электромагнитного поля:

$$H_{\text{int}}^{(s)} = \mu_0 J_{\mu\nu} F_{\nu\mu} = -\frac{i\mu_0}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} \right). \quad (3.83)$$

Добавляя соответствующее слагаемое к действию (3.37), получаем [11, 12]

$$S = \frac{1}{8\pi} \int \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right)^2 - (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] dV dt - \\ - \frac{1}{2m_0} \int \left[\left(i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\mu} - \frac{q_0}{c} A_\mu \bar{\Psi} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x_\mu} - \frac{q_0}{c} A_\mu \Psi \right) + m_0^2 c^2 \bar{\Psi} \Psi \right] dV dt + \\ + \frac{i\mu_0}{2} \int \bar{\Psi} \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu} \Psi dV. \quad (3.84)$$

Действие является действительной величиной. Второе слагаемое в (3.84) является действительным, если в качестве сопряженной волновой функции взять эрмитово-сопряженную функцию $\bar{\Psi}^+ = (\varphi^+, \chi^+)$. Однако третье слагаемое в (3.84) не является в этом случае действительным. Перепишем (3.83) в следующем виде:

$$\mu_0 J_{\mu\nu} F_{\nu\mu} = -\frac{i\mu_0}{2} \gamma_i \gamma_j \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) - \frac{\mu_0}{2} (\gamma_i \gamma_4 - \gamma_4 \gamma_i) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} \right).$$

Полагая $\bar{\Psi} = \Psi^+$ и выбирая в качестве матриц γ_μ эрмитовы матрицы, получаем

$$(-i\Psi^+ \gamma_i \gamma_j \Psi)^* = i\Psi^+ \gamma_j^+ \gamma_i^+ \Psi = -i\Psi^+ \gamma_i \gamma_j \Psi, \quad (3.85)$$

$$(\Psi^+ (\gamma_i \gamma_4 - \gamma_4 \gamma_i) \Psi)^* = \Psi^+ (\gamma_4^+ \gamma_i^+ - \gamma_i^+ \gamma_4^+) \Psi = \\ = -\Psi^+ (\gamma_i \gamma_4 - \gamma_4 \gamma_i) \Psi. \quad (3.86)$$

Таким образом, выражение (3.85) является действительным, а (3.86) — мнимым.

Однако если в качестве сопряженной волновой функции $\bar{\Psi}$ взять дираковски сопряженную волновую функцию

$$\bar{\Psi} = \Psi^+ \gamma_4, \quad (3.87)$$

то действие (3.84) становится действительной величиной.

Глава 4

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ СКАЛЯРНАЯ ЧАСТИЦА

Анализ трансформационных свойств волновых функций, проведенный в предыдущей главе, показал, что оператор волнового уравнения, инвариантного относительно не только пространственно-пространственных, но и пространственно-временных вращений, должен быть квадратичной формой оператора 4-импульса p_μ . Только в этом случае все компоненты генератора преобразования вращений в четырехмерном пространстве $J_{\mu\nu}$ коммутируют с оператором волнового уравнения свободной частицы, т. е. отвечают сохраняющимся величинам. Неудивительно поэтому, что в рамках релятивистских уравнений, линейных по оператору $p_4 = -i\hbar \partial/\partial x_4$, оператор пространственно-временных вращений \mathbf{k} объявляется оператором буста, т. е. вспомогательным оператором, не отвечающим физически наблюдаемой величине.

С точки зрения понятийного аппарата волновой теории материального поля, принципиальное отличие свойств решений волновых уравнений материального поля, включающих вторую производную по времени, от свойств волновых уравнений, включающих лишь первую производную по времени, состоит в том, что временная компонента плотности потока перестает быть билинейной комбинацией волновой функции и сопряженной волновой функции и принимает вид

$$\rho(x) = \frac{1}{m_0 c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - q_0 \psi^* \varphi \psi \right], \quad (4.1)$$

т. е. становится билинейной комбинацией волновой функции и временной производной от сопряженной волновой функции.

Поскольку уравнение КГФ является уравнением второго порядка по временной производной, общее решение содержит два линейно независимых временных решения. Это означает, что задания пространственных квантовых чисел недостаточно для определения состояния материального поля. Например, задание трех компонент импульса свободной частицы \mathbf{p} не определяет однозначно ее состояние, поскольку каждому \mathbf{p} отвечают два собственных значения энергии:

$$E_{\mathbf{p}} = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (4.2)$$

Такое же соотношение между энергией и импульсом возникает и в классической релятивистской механике. Однако в классической механике физически реализуемым состояниям частицы отвечает лишь знак плюс, поскольку при знаке минус энергия частицы неограниченно

убывает с ростом величины ее импульса. Именно это обстоятельство привело к отказу от волновых уравнений материального поля, включающих вторую производную по времени.

Двум собственным значениям (4.2) отвечают отличающиеся по знаку значения $\rho(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \pm \frac{\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}}{m_0 c^2} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t),$$

т. е. временная компонента 4-вектора плотности потока (4.1) не является заведомо положительной величиной. Поскольку временная компонента 4-вектора плотности потока определяет плотность вероятности обнаружения частицы в точке \mathbf{r} в момент времени t , то это послужило дополнительным аргументом в пользу отказа от волновых материальных уравнений, включающих вторую производную по времени, и поиска уравнений, линейных по оператору временной производной.

Однако число состояний материального поля уравнений со второй временной производной удваивается, поскольку каждому набору пространственных квантовых чисел отвечают два собственных значения энергии. Вместе с тем именно отрицательным собственным значениям (4.2) отвечает отрицательная вероятность. В настоящей книге мы покажем, что удвоение пространства состояний волновых уравнений со второй производной по времени приводит к появлению в теории зеркальных частиц как новых состояний материального поля, а их последовательная теория базируется на введении понятия отрицательной вероятности. Наряду с математическим описанием зеркальных частиц, развиваемая теория дает возможность определения физического смысла термина «темная материя». Как мы увидим, еще одно астрофизическое явление, скрывающееся за термином «черные дыры», также находит свое вполне последовательное объяснение. Эти термины давно уже вошли в обиход, и, что более важно, их появление обусловлено интерпретацией экспериментально наблюдаемых данных. Однако, на наш взгляд, явления, стоящие за этими терминами, не обрели пока последовательной математической базы, что и внесло некую эмоциональную окраску в используемую терминологию.

Переход от волновых уравнений, линейных по временной производной, к волновым уравнениям, включающим вторую производную по времени, приводит к изменению математического аппарата теории. В частности, изменение вида временной компоненты плотности потока с неизбежностью приводит к изменению определения средних квантово-механических операторов и, в частности, определения энергии частицы. Настоящая глава посвящена обсуждению математического аппарата волновых материальных уравнений со второй временной производной. Мы рассмотрим условия нормировки и ортогональности волновых функций, приведем выражения для квантово-механических средних, дадим интерпретацию понятия отрицательной вероятности.

Затем на примере свободной частицы рассмотрим специфику пространства состояний скалярного материального поля. Последний раздел главы посвящен обсуждению *CPT*-преобразований уравнения КГФ для частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем. Указанные преобразования симметрии будут использоваться в последующем изложении для интерпретации специфики состояний скалярного материального поля, описываемого уравнением со второй производной по времени.

4.1. Волновая функция уравнения КГФ и ее свойства

Итак, наличие второй производной по времени в уравнении КГФ существенно отличает это уравнение от нерелятивистского уравнения Шредингера и любых других (в том числе и релятивистских) волновых уравнений, линейных по оператору p_4 . Это приводит к значительному изменению не только математического аппарата, но и базовых понятий волновой теории материального поля. Поэтому настоящий раздел будет посвящен обсуждению специфики аппарата релятивистской квантовой механики, основанной на уравнениях, включающих вторую временную производную.

4.1.1. Уравнение непрерывности и 4-вектор плотности потока.

Уравнение КГФ для частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем, имеет вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi = 0, \quad (4.3)$$

где $U = q_0 \varphi$. Введем дифференциальный оператор этого уравнения:

$$\hat{Z} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U \right)^2 + m_0^2 c^2 \right]. \quad (4.4)$$

Несмотря на то что оператор (4.4) имеет размерность энергии, этот оператор не является гамильтонианом, поскольку функция Гамильтона материального скалярного поля определяется вторым слагаемым в выражении (3.44). В нерелятивистском пределе $|U| \ll m_0 c^2$ этот оператор преобразуется в следующий:

$$\hat{Z} \Big|_{|U| \ll m_0 c^2} \approx \left[\frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U \right] - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H}_0 - \hat{E},$$

где \hat{H}_0 — оператор Гамильтона уравнения Шредингера:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U,$$

и

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

В рамках теорий, линейных по оператору p_4 , оператор \widehat{E} играет роль оператора энергии. Действительно, собственные волновые функции оператора \widehat{E} , отвечающие собственным значениям E_n , являются решением уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = E_n \psi_n$$

и имеют вид

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = u_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right).$$

Если оператор \widehat{E} коммутирует с гамильтонианом \widehat{H}_0 , то эти два оператора имеют общий набор собственных функций, поэтому, представляя решения уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \widehat{H}_0 \psi$$

в виде разложения

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n u_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right),$$

для квантово-механического среднего оператора \widehat{E} получаем

$$\langle \widehat{E} \rangle = \int \psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi dV = \sum_n E_n |a_n|^2.$$

В рамках волновых уравнений, линейных по временной производной, квантово-механические средние операторов определяются как пространственные интегралы от билинейных комбинаций волновой функции и сопряженной волновой функции следующего вида: $\langle \widehat{L} \rangle = \int \psi^* \widehat{L} \psi dV$. В рамках теорий, квадратичных по оператору временной производной, пространственные интегралы от указанных билинейных комбинаций перестают определять квантово-механические средние операторов. Однако билинейные комбинации вида $\psi^* \widehat{L} \psi$ по-прежнему играют очень важную роль. Действительно, умножив уравнение (4.3) на комплексно сопряженную волновую функцию ψ^* , а уравнение для комплексно сопряженной функции $\widehat{Z}^* \psi^* = 0$ — на волновую функцию ψ и взяв затем разность получившихся соотношений, мы приходим к уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (4.5)$$

где компоненты 4-вектора плотности потока имеют вид

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m_0 c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - \psi^* U \psi \right], \quad (4.6)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \psi^* \cdot \psi - \psi^* \cdot \nabla \psi) - \frac{q_0}{c} \psi^* \mathbf{A} \psi \right]. \quad (4.7)$$

Уравнение (4.5) имеет вид уравнения непрерывности и может быть записано в релятивистски инвариантном виде

$$\frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} = 0,$$

где

$$j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho). \quad (4.8)$$

Несложно видеть, что для свободной частицы пространственные компоненты 4-вектора плотности потока j_μ являются билинейными комбинациями оператора скорости $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{p}/m_0$:

$$\psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi \rightarrow \frac{i\hbar}{2m_0} (\nabla \psi^* \cdot \psi - \psi^* \cdot \nabla \psi) = \mathbf{j}, \quad (4.9)$$

а временная компонента – билинейной комбинацией оператора \hat{E}/m_0c^2 :

$$\psi^* \frac{\hat{E}}{m_0c^2} \psi \rightarrow -\frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \rho. \quad (4.10)$$

Поскольку плотность вероятности и плотность потока материального поля должны быть действительными функциями, то правые части соотношений (4.9) и (4.10) представляют собой симметризованные билинейные комбинации. Отметим, что в (4.9) мы использовали обозначение, согласно которому оператор действует лишь на волновую функцию, находящуюся по одну с ним сторону от точки.

Итак, мы видим, что в случае уравнения (4.3) билинейная комбинация волновой функции и сопряженной волновой функции с оператором $i\hbar \partial/\partial t$ определяет временную компоненту 4-вектора плотности потока. Такая структура 4-вектора плотности потока вполне естественна с точки зрения преобразований Лоренца, поскольку уравнение для 4-вектора плотности потока (4.8) приобретает в этом случае релятивистски инвариантный вид. Действительно, запишем волновую функцию $\psi(x)$ в виде

$$\psi(x) = f(x) \exp[i\Phi(x)],$$

где $f(x)$ — амплитуда волновой функции материального поля, как функция 4-координат $x = (\mathbf{r}, ict)$, а $\Phi(x)$ — фаза. Тогда, для 4-вектора плотности потока (4.8) получаем

$$j_\mu(x) = \frac{\hbar}{m_0} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu} - \frac{q_0}{\hbar c} A_\mu \right) f^2(x).$$

Нетрудно видеть, что получившееся уравнение имеет релятивистски инвариантный вид. Например, в случае свободной частицы ($A_\mu = 0$), находящейся в состоянии, соответствующем плоской волне, фаза Φ имеет вид: $\Phi = \mathbf{kr} - \omega t$. В этом случае пространственные компоненты 4-вектора плотности потока пропорциональны волновому вектору, а временная компонента — частоте.

Таким образом, мы видим, что оператор временной производной в рамках теорий, основанных на волновых уравнениях со второй временной производной, выполняет более широкие функции и перестает непосредственно ассоциироваться лишь с оператором энергии. Как мы увидим позже, билинейные комбинации вида $\psi^* \widehat{L} \psi$ определяют локальные характеристики состояния материального поля. Выражения, определяющие квантово-механические средние операторов, будут получены ниже.

В рамках нерелятивистской квантовой механики физический смысл волновой функции постулируется следующим утверждением: величина $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ есть плотность вероятности обнаружения частицы в точке \mathbf{r} в момент времени t . Следовательно, вероятность нахождения частицы в объеме V в момент времени t определяется интегралом

$$p_V(t) = \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV. \quad (4.11)$$

Пусть соотношение (4.11) выполняется в лабораторной (т.е. неподвижной относительно границ области V) системе отсчета. Поскольку вероятность нахождения частицы в определенной области пространства является наблюдаемой величиной, то эта вероятность не должна зависеть от выбора системы отсчета, в которой эта вероятность измеряется. Следовательно, в системе отсчета, движущейся относительно лабораторной с произвольной скоростью \mathbf{v}_0 , эта вероятность задается соотношением

$$p_{V'}(t') = \int_{V'} |\psi(\mathbf{r}', t')|^2 dV',$$

где объем V' является тем же самым участком пространства, что и объем V в лабораторной системе координат. Поскольку в рамках преобразования Галилея $t = t'$ и $dV = dV'$, то

$$p_V(t) = p_{V'}(t').$$

Однако в рамках релятивистской теории возникают два существенных отличия. Во-первых, элементарный объем dV при преобразованиях Лоренца не остается неизменным, а преобразуется согласно правилам

$$dV = dV' / \sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2}},$$

откуда следует, что

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV \neq |\psi(\mathbf{r}', t')|^2 dV'.$$

Во-вторых, $\rho(\mathbf{r}, t)$ является временной компонентой 4-вектора плотности потока $j_\mu(x)$, и, следовательно, при изменении системы отсчета она

не остается неизменной, а преобразуется согласно законам преобразования 4-векторов:

$$j'_\mu = a_{\mu\nu} j_\nu.$$

В релятивистском случае инвариантной величиной относительно преобразований Лоренца является не величина dV , а величина 4-объема $d\Omega = c dt dV$. Релятивистски инвариантное выражение для вероятности нахождения частицы в объеме V в момент времени t имеет вид: $p(t) = \frac{1}{c} \int_{V(t)} j_\mu dS_\mu$, где интегрирование ведется по гиперплоскости $S_4(t) = V(t)$. Вероятность нахождения частицы в объеме V в момент времени $t + \Delta t$ определяется интегралом по гиперплоскости $S_4(t + \Delta t) = V(t + \Delta t)$, а разность вероятностей определяется выражением

$$p(t + \Delta t) - p(t) = \int_{V(t+\Delta t)} j_\mu dS_\mu - \int_{V(t)} j_\mu dS_\mu.$$

Полагая $j_\mu = j_\mu(\psi^*, \psi)$ и устремляя $\Delta t \rightarrow 0$, несложно показать, что в рамках релятивистской теории временная компонента 4-вектора плотности потока принимает вид (4.10).

Несложно также показать, что указанное определение вероятности находится в соответствии с уравнением непрерывности (4.5). Действительно, пусть интегрирование ведется по всей гиперплоскости $t = \text{const}$, т. е. по всему трехмерному пространству, тогда, полагая, что на бесконечности волновая функция обращается в нуль, разность двух указанных интегралов можно представить в виде поверхностного интеграла по замкнутой гиперповерхности объема четырехмерного пространства, лежащего между гиперплоскостями $V(t_2)$ и $V(t_1)$. Следовательно, в этом случае получаем

$$p(t_2) - p(t_1) = \frac{1}{c} \oint j_\mu dS_\mu = \frac{1}{c} \int_{\Delta\Omega} \frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} d\Omega = 0. \quad (4.12)$$

Таким образом, вероятность найти частицу в пределах бесконечного трехмерного объема не зависит от времени, т. е. остается неизменной.

Отметим, что интегрирование в (4.12) можно производить по произвольной гиперплоскости, а не только по гиперплоскости $t = \text{const}$, необходимо лишь, чтобы интеграл по «боковой» гиперповерхности 4-объема между двумя выбранными гиперплоскостями был равен нулю. Учитывая конечную скорость распространения частиц, этому условию всегда можно удовлетворить, если задавать состояние свободных частиц в виде волновых пакетов. Ниже, обсуждая условия нормировки волновых функций непрерывного спектра и рассматривая задачи рассеяния частиц, мы будем неоднократно обращаться к соотношению (4.12) и обсудим его более подробно.

В заключение данного раздела отметим, что, умножая 4-вектор плотности потока (4.8) на величину заряда частицы q_0 , мы получаем выражение для 4-вектора плотности тока:

$$j_{\mu}^{(e)} = q_0 j_{\mu}. \quad (4.13)$$

Несложно видеть, что получившееся выражение совпадает с формулами (3.40) и (3.41), полученными в гл. 3 путем вариации действия частицы по полевым переменным. Следовательно, выражение (4.12) можно интерпретировать также как закон сохранения заряда в рассматриваемой пространственно-временной области.

4.1.2. Условие ортогональности собственных волновых функций. Важную роль в квантовой механике играют стационарные краевые задачи. Решения этих задач позволяют определять энергетический спектр связанных состояний частицы во внешнем поле, рассчитывать сечения рассеяния свободных частиц и т. д. Собственные волновые функции краевых задач составляют базис для поиска решений нестационарных задач. Весьма эффективным и широко распространенным приемом решения нестационарных волновых уравнений является метод, основанный на разложении волновой функции нестационарного уравнения в ряд по собственным функциям стационарных краевых задач. Краеугольным камнем такого подхода является свойство ортогональности собственных функций стационарной краевой задачи.

Рассмотрим стационарную краевую задачу уравнения КГФ, т. е. положим, что 4-потенциал электромагнитного поля в уравнении (4.3) имеет вид: $A_{\mu}(x) = A_{\mu}^{(0)}(\mathbf{r})$. Собственные волновые функции $u_n(\mathbf{r})$ указанной краевой задачи, отвечающие собственным значениям E_n , являются решениями уравнения

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 - \frac{1}{c^2} (E_n - U_0(\mathbf{r}))^2 + m_0^2 c^2 \right] u_n(\mathbf{r}) = 0 \quad (4.14)$$

с заданными граничными условиями. Для одномерных краевых задач граничные условия сводятся к заданию асимптотической формы решений при $z \rightarrow \pm\infty$, а для трехмерных задач в задании асимптотической формы при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$. Детальный вид граничных условий мы обсудим позже, когда перейдем к анализу соответствующих задач.

Поскольку уравнение (4.3) является квадратичной формой оператора p_4 , то краевая задача (4.14) является квадратичной формой собственного значения E_n . Это обстоятельство вносит значительную специфику в свойства собственных функций и собственных решений указанной задачи по сравнению с нерелятивистскими уравнениями. Действительно, пусть, например, частица является свободной, т. е.

$$\mathbf{A}_0(\mathbf{r}) = 0, \quad \varphi_0(\mathbf{r}) = 0.$$

В этом случае собственными решениями уравнения (4.14) являются плоские волны

$$u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \exp\left(i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right).$$

Как мы видим, состояние частицы в пространстве координат \mathbf{r} задается тремя квантовыми числами, что вполне естественно и связано с размерностью указанного подпространства. В случае свободной частицы совокупность указанных трех квантовых чисел составляет, например, величина проекций собственных значений оператора импульса \mathbf{p} . Однако для задания состояния частицы в четырехмерном пространстве $x = (\mathbf{r}, ict)$ указанных трех квантовых чисел становится недостаточно. Действительно, каждому из собственных значений \mathbf{p} отвечают два собственных значения энергии:

$$E_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \pm\Gamma, \quad (4.15)$$

где

$$\Gamma = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}.$$

Двум решениям уравнения (4.3), имеющим одинаковую зависимость от координат \mathbf{r} ,

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-i\frac{\Gamma t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right), \quad \psi_{\mathbf{p}}^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \exp\left(i\frac{\Gamma t + \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right), \quad (4.16)$$

отвечают два различных состояния частицы. В самом деле, несложно видеть, что фазовые скорости частиц, находящихся в состояниях $\psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$, противоположно направлены.

Формулы (4.15) и (4.16) являются частной иллюстрацией фундаментального различия понятий состояния частицы в рамках релятивистских и нерелятивистских теорий. В отличие от нерелятивистской квантовой механики, где задания квантовых чисел, определяющих вид пространственной волновой функции частицы (например, квантовых чисел \mathbf{p}), достаточно для определения состояния частицы, в рамках релятивистской квантовой механики задания квантовых чисел, определяющих вид пространственной волновой функции, недостаточно для полного определения состояния частицы. Следовательно, разложение полной волновой функции уравнения (4.3) по собственным волновым функциям краевой задачи (4.14) будет иметь в общем случае вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{n}} \left[a_{\mathbf{n}}^{(+)} u_{\mathbf{n}}^{(+)}(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_{\mathbf{n}}^{(+)}}{\hbar}t\right) + a_{\mathbf{n}}^{(-)} u_{\mathbf{n}}^{(-)}(\mathbf{r}) \exp\left(i\frac{E_{\mathbf{n}}^{(-)}}{\hbar}t\right) \right], \quad (4.17)$$

где $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ — совокупность трех пространственных квантовых чисел, а квантовое число $\lambda = \pm$ естественно возникает как результат квадратичной зависимости собственных значений E_n от простран-

ственных квантовых чисел. В целях краткости записи мы использовали единый индекс суммирования \mathbf{n} для двух линейно независимых временных решений в (4.17). Однако в общем случае пространственные квантовые числа $\mathbf{n}^{(\pm)}$, соответствующие собственным значениям $E_{\mathbf{n}}^{(\pm)}$, могут и различаться. Это видно уже из решений для свободной частицы (4.16). Как мы отмечали выше, решения $\psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ соответствуют частицам, движущимся в противоположных направлениях. Следовательно, краевые условия, задаваемые на границах $z \rightarrow \pm\infty$, для этих двух решений будут отличаться.

Итак, из вышеприведенного обсуждения следует, что квантовое число n краевой задачи (4.14) является совокупностью четырех квантовых чисел $n = (\mathbf{n}, \lambda)$, где $\lambda = \pm$. Пусть $u_n(\mathbf{r})$ является собственной функцией краевой задачи (4.14), уравнение для комплексно сопряженной волновой функции имеет вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 - \frac{1}{c^2} (E_m - U_0(\mathbf{r}))^2 + m_0^2 c^2 \right] u_m^*(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.18)$$

Умножая уравнение (4.14) на u_m^* , а уравнение (4.18) на u_n и вычитая затем получившиеся уравнения друг из друга, приходим к следующему соотношению

$$\begin{aligned} \frac{E_n - E_m}{2m_0 c^2} u_m^* (E_n + E_m - 2U) u_n = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla \left(u_m^* \cdot \nabla u_n - \nabla u_m^* \cdot u_n - i \frac{2q_0}{\hbar c} u_m^* \mathbf{A} u_n \right). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Интегрируя (4.19) по бесконечному объему, получаем

$$\frac{E_n - E_m}{m_0 c^2} \int u_m^*(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U(\mathbf{r}) \right) u_n(\mathbf{r}) dV = 0. \quad (4.20)$$

Несложно видеть, что последнее выражение приводит нас к условию ортонормируемости собственных волновых функций краевой задачи (4.14):

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_0 c^2} \int \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')*}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{E_{\mathbf{n}}^{(\lambda)} + E_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}}{2} - U(\mathbf{r}) \right) \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)}(\mathbf{r}, t) dV = \\ = \pm \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{nm}}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

где

$$\psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) = u_{\mathbf{n}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \exp \left(\mp i \frac{E_{\mathbf{n}}^{(\pm)}}{\hbar} t \right). \quad (4.22)$$

Определив спектр собственных значений и собственных функций краевой задачи (4.14), мы можем разложить волновую функцию нестационарного уравнения (4.3) в ряд по полученным собственным функциям. С математической точки зрения, отличие дифференциальных уравнений со второй производной по времени от уравнений линейных

по оператору временной производной состоит в том, что их общее решение зависит не только от значения волновой функции в начальный момент времени, но и от значения ее производной. Поэтому для однозначного определения коэффициентов разложения (4.17) мы должны воспользоваться также и разложением производной волновой функции:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \sum_{\mathbf{n}} \left[E_{\mathbf{n}}^{(+)} a_{\mathbf{n}}^{(+)} u_{\mathbf{n}}^{(+)}(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_{\mathbf{n}}^{(+)} t}{\hbar}\right) - E_{\mathbf{n}}^{(-)} a_{\mathbf{n}}^{(-)} u_{\mathbf{n}}^{(-)}(\mathbf{r}) \exp\left(i \frac{E_{\mathbf{n}}^{(-)} t}{\hbar}\right) \right]. \quad (4.23)$$

Умножая уравнение (4.23) на волновую функцию (4.22), а уравнение (4.17) на производную от этой функции, после несложных преобразований получаем

$$a_{\mathbf{n}}^{(\pm)}(t) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*}}{\partial t} \psi \right) - \psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*} U_0 \psi \right] dV. \quad (4.24)$$

Полученное соотношение позволяет нам определить начальные значения коэффициентов $a_{\mathbf{n}}^{(\pm)}$. Несложно видеть, что значения $a_{\mathbf{n}}^{(\pm)}(0)$ зависят как от начального значения волновой функции $\psi(\mathbf{r}, 0)$, так и от ее производной $\partial \psi(\mathbf{r}, 0) / \partial t$.

Уравнение, определяющее временную динамику изменения коэффициентов $a_{\mathbf{n}}^{(\pm)}$, может быть получено следующим образом. Волновая функция, комплексно сопряженная (4.22), является решением следующего уравнения:

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + q_0 \varphi_0(\mathbf{r}) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*}(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.25)$$

Умножим уравнение (4.3) на волновую функцию $\psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*}$, а уравнение (4.25) — на волновую функцию ψ . Взаимно вычитая затем полученные соотношения и интегрируя по объему, после несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{m_0 c^2} \frac{d}{dt} \int \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*}}{\partial t} \psi \right) - \psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*} U_0 \psi \right] dV = \\ = - \frac{q_0}{m_0 c} \int \psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*} (A_{\mu} - A_{\mu}^{(0)}) p_{\mu} \psi dV + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \int \psi_{\mathbf{n}}^{(\pm)*} (A_{\mu}^2 - A_{\mu}^{(0)2}) \psi dV. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Сравнивая левую часть уравнения (4.26) с (4.24), мы видим, что она имеет вид $i\hbar (da_{\mathbf{n}}^{(\pm)} / dt)$. Подставляя в левую часть уравнения (4.26) разложения (4.17) и (4.23), мы приходим к системе дифференциальных

уравнений для коэффициентов $a_{\mathbf{n}}^{(\pm)}(t)$ следующего вида:

$$i\hbar \frac{da_{\mathbf{n}}^{(\lambda)}}{dt} = \sum_{\mathbf{m}, \lambda'} V_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} a_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}, \quad (4.27)$$

где $\lambda, \lambda' = \pm$.

Отметим, что в случае когда $A_{\mu}(x) = A_{\mu}^{(0)}(\mathbf{r})$, уравнение (4.26) принимает вид

$$\frac{da_{\mathbf{n}}^{(\pm)}}{dt} = 0.$$

Следовательно, решение нестационарного уравнения

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0(\mathbf{r}) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi = 0 \quad (4.28)$$

имеет вид ряда (4.17) с постоянными коэффициентами $a_{\mathbf{n}}^{(\pm)}$, которые определяются выражениями

$$a_{\mathbf{n}}^{(\pm)} = \frac{1}{m_0 c^2} \int \left[\frac{1}{2} u_{\mathbf{n}}^{(\pm)*}(\mathbf{r}) \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{r}, 0) \pm E_{\mathbf{n}}^{(\pm)} \psi(\mathbf{r}, 0) \right) - u_{\mathbf{n}}^{(\pm)*}(\mathbf{r}) U_0(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, 0) \right] dV.$$

Таким образом, собственные решения краевой задачи (4.14) позволяют определить решение нестационарного уравнения (4.28) с произвольными начальными условиями.

4.1.3. Энергия частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем. В гл. 3 исходя из действия для релятивистской скалярной частицы мы получили следующее выражение для функции Гамильтона, определяющей плотность энергии электромагнитного и материального полей:

$$\begin{aligned} H &= \Pi \dot{\mathbf{A}} + (\pi^* \dot{\psi} + \dot{\psi}^* \pi) - L = \\ &= \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi)^2 + (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] + \frac{1}{2m_0} \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{q_0^2}{c^2} \varphi^2 \psi^* \psi + \right. \\ &\quad \left. + \left(i\hbar \nabla \psi^* - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi^* \right) \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi \right) + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right]. \quad (4.29) \end{aligned}$$

Как видно, выражение для плотности энергии состоит из двух слагаемых, одно из которых зависит от потенциалов электромагнитного поля и не зависит явно от волновой функции частицы, а второе зависит явно от волновой функции материального поля. Следовательно, первое слагаемое связано с плотностью энергии электромагнитного поля:

$$w_1 = \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi)^2 + (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right], \quad (4.30)$$

а второе — с плотностью энергии материального поля:

$$w_2 = \frac{1}{2m_0} \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{q_0^2}{c^2} \varphi^2 \psi^* \psi + \left(i\hbar \nabla \psi^* - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi^* \right) \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \psi \right) + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right]. \quad (4.31)$$

Уравнения, определяющие эволюцию функций $w_{1,2}(\mathbf{r}, t)$, могут быть получены непосредственно из уравнения для волновой функции частицы (3.38) и уравнений для потенциалов электромагнитного поля (3.39).

Действительно, умножим обе части уравнения (3.39) на $\partial A_\mu / \partial t$:

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial t} \frac{\partial^2 A_\mu}{\partial x_\nu^2} - \frac{\partial A_\mu}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\nu} \right) = -\frac{4\pi}{c} \frac{\partial A_\mu}{\partial t} j_\mu^{(e)}.$$

После несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi)^2 + (\text{rot} \mathbf{A})^2 \right] = \\ = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j}_e - \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rho_e + \frac{1}{4\pi} \text{div} \left(\left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{B} \right] - \frac{\partial \varphi}{\partial t} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right) \right). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Как видно, левая часть получившегося выражения совпадает с производной от $w_1(\mathbf{r}, t)$. Воспользуемся следующими равенствами векторной алгебры:

$$(\nabla \varphi)^2 = -\varphi \Delta \varphi + \text{div}(\varphi \nabla \varphi), \quad (4.33)$$

$$\frac{1}{c} \text{div} \left(\varphi \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \nabla \varphi + \frac{1}{c} \varphi \frac{\partial}{\partial t} \text{div} \mathbf{A} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \nabla \varphi - \frac{1}{c^2} \varphi \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}. \quad (4.34)$$

Используя эти соотношения, получаем

$$w_1(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) + \frac{1}{4\pi} \varphi \left(\Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right) - \frac{1}{4\pi} \text{div} \left(\varphi \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right) \right). \quad (4.35)$$

Первое слагаемое определяет плотность энергии электромагнитного поля

$$w_{em} = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2).$$

Второе слагаемое при учете лоренцевской калибровки поля принимает вид

$$\frac{1}{4\pi} \varphi \left(\Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right) = -\varphi \rho_e.$$

Отметим, что скалярный потенциал является суммой потенциалов, создаваемых внешними зарядами, и потенциала, создаваемого рассматриваемой частицей. Учитывая, что частицы являются точечными и поэтому не взаимодействуют с создаваемыми ими полями, несложно

видеть, что последнее выражение определяет со знаком минус потенциальную энергию частицы во внешнем скалярном поле. Таким образом, выражение (4.35) принимает вид

$$w_1(\mathbf{r}, t) = w_{em} - q_0\varphi\rho + \frac{1}{4\pi} \operatorname{div}(\varphi\mathbf{E}). \quad (4.36)$$

Воспользуемся уравнением непрерывности (4.5), тогда первые два слагаемых в правой части (4.32) можно преобразовать к следующему виду:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} - \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rho = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} - \frac{\partial}{\partial t}(\varphi\rho) - \varphi \operatorname{div} \mathbf{j} = -\mathbf{E}\mathbf{j} - \frac{\partial}{\partial t}(\varphi\rho) - \operatorname{div}(\varphi\mathbf{j}).$$

В свою очередь

$$\operatorname{div}(\varphi\mathbf{j}_e) = \frac{c}{4\pi} \operatorname{div} \left(\varphi \left(\operatorname{rot} \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \right) = -\frac{c}{4\pi} \operatorname{div} \left([\nabla\varphi\mathbf{B}] + \varphi \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right).$$

Подставляя последние выражения в (4.32), получаем

$$\frac{\partial w_1}{\partial t} = -\mathbf{E}\mathbf{j}_e - \frac{c}{4\pi} \operatorname{div}[\mathbf{E}\mathbf{B}] + \frac{\partial}{\partial t} \left(-q_0\varphi\rho + \frac{1}{4\pi} \operatorname{div}(\varphi\mathbf{E}) \right). \quad (4.37)$$

Учитывая (4.36), приходим к следующему соотношению

$$\frac{\partial w_{em}}{\partial t} = -\mathbf{E}\mathbf{j}_e - \frac{c}{4\pi} \operatorname{div}[\mathbf{E}\mathbf{B}]. \quad (4.38)$$

Как следует из (4.38), соотношение (4.32) эквивалентно теореме Пойнтинга классической электродинамики.

Обратимся теперь к выводу уравнения, определяющего эволюцию плотности энергии w_2 . Умножим уравнение (4.3) на $\partial\psi^*/\partial t$, а уравнение, комплексно сопряженное (4.3), — на $\partial\psi/\partial t$. Складывая получившиеся выражения, получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{2m_0c^2} \left(\hbar^2 \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \frac{\partial\psi}{\partial t} - q_0^2 \varphi^2 \psi^* \psi \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2m_0} \left[\left(i\hbar\nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \left(-i\hbar\nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right] \right\} = \\ = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j}_e + \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rho_e + \operatorname{div} \left\{ \frac{i\hbar}{2m_0} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) \right\}. \quad (4.39) \end{aligned}$$

Как видно, левая часть получившегося выражения совпадает с временной производной от плотности энергии w_2 , определяемой выражением (4.31). В целях наглядности дальнейших преобразований представим оператор \widehat{Z} , определяющийся выражением (4.4), в следующем виде:

$$\widehat{Z} = \widehat{K} - \widehat{T} = 0,$$

где

$$\widehat{K} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m_0^2 c^2 \right], \quad \widehat{T} = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right)^2.$$

После несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0 c^2} \left(\hbar^2 \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial t} - q_0^2 \varphi^2 \psi^* \psi \right) = \\ & = \frac{1}{2} \left(\psi^* \cdot \widehat{T} \psi + \widehat{T}^+ \psi^* \cdot \psi \right) + q_0 \varphi \rho + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right), \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0} \left[\left(i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi + m_0^2 c^2 \psi^* \psi \right] = \\ & = \frac{1}{2} \left(\psi^* \cdot \widehat{K} \psi + \widehat{K}^+ \psi^* \cdot \psi \right) + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla \cdot \left(\psi^* \cdot \nabla \psi + \nabla \psi^* \cdot \psi \right), \end{aligned} \quad (4.41)$$

где \widehat{K}^+ — эрмитово-сопряженный оператор, мы воспользовались правилом, согласно которому оператор действует лишь на волновую функцию, стоящую по одну с ним сторону от точки. Суммируя указанные соотношения, получаем два эквивалентных выражения:

$$\begin{aligned} w_2 = & \left(\psi^* \cdot \widehat{T} \psi + \widehat{T}^+ \psi^* \cdot \psi \right) + q_0 \varphi \rho + \\ & + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla \cdot \left(\psi^* \cdot \nabla \psi + \nabla \psi^* \cdot \psi \right) + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right), \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\begin{aligned} w_2 = & \left(\psi^* \cdot \widehat{K} \psi + \widehat{K}^+ \psi^* \cdot \psi \right) + q_0 \varphi \rho + \\ & + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla \cdot \left(\psi^* \cdot \nabla \psi + \nabla \psi^* \cdot \psi \right) + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Как мы отмечали выше, выражение для плотности энергии w_2 зависит явно от волновой функции частицы и, следовательно, определяет энергию материального поля. Рассмотрим стационарное состояние с волновой функцией

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = u_n(\mathbf{r}) \exp(-i\omega_n t), \quad (4.44)$$

где $u_n(\mathbf{r})$ — собственная волновая функция краевой задачи (4.14). Подставляя волновую функцию (4.44) в выражение (4.42) и интегрируя по бесконечному трехмерному объему, для энергии частицы в указанном состоянии получаем

$$E_n = \int w_2^{(n)} dV = \frac{\hbar \omega_n}{m_0 c^2} \int u_n^*(\mathbf{r}) (\hbar \omega_n - U(\mathbf{r})) u_n(\mathbf{r}) dV. \quad (4.45)$$

Учитывая (4.21), несложно видеть, что знак энергии частицы E_n в состоянии $n = (\mathbf{n}, \lambda)$ может не совпадать со знаком собственных значений $\hbar \omega_n$. Таким образом, если в рамках теорий, линейных по временной производной, энергия частицы в состоянии с волновой функцией $u_n(\mathbf{r})$ отождествляется с собственными значениями краевых за-

дач, то в рамках теорий, квадратичных по оператору временной производной, энергия частицы в указанных состояниях может отличаться по знаку от собственных значений.

В общем случае выражение (4.42) имеет вид

$$w_2 = \frac{1}{2m_0c^2} \left[\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} \psi \right) - \right. \\ \left. - i\hbar q_0\varphi \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \psi \right) \right] + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi + \nabla \psi^* \cdot \psi). \quad (4.46)$$

Обращаясь к уравнению (4.39), несложно видеть, что последнее слагаемое в (4.46), являясь полной дивергенцией, может быть перенесено в правую часть уравнения (4.39). Используя введенный выше оператор $\hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$, оставшуюся часть соотношения (4.46) можно записать в следующем виде:

$$w_p = \frac{1}{2m_0c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \cdot \hat{E}\psi - \psi^* \cdot \hat{E} \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi\psi^* \cdot \hat{E}\psi \right] + \\ + \frac{1}{2m_0c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\hat{E}^+ \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \cdot \psi - \hat{E}^+ \psi^* \cdot \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi \hat{E}^+ \psi^* \cdot \psi \right], \quad (4.47)$$

где \hat{E}^+ — эрмитово-сопряженный оператор:

$$\hat{E}^+ = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Учитывая определение плотности потока и условие нормировки волновых функций, несложно видеть, что пространственный интеграл от (4.47) определяет квантово-механическое среднее энергии частицы:

$$E_p = \int w_p dV = \frac{1}{2m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \cdot \hat{E}\psi - \psi^* \cdot \hat{E} \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi\psi^* \cdot \hat{E}\psi \right] dV + \\ + \frac{1}{2m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\hat{E}^+ \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \cdot \psi - \hat{E}^+ \psi^* \cdot \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi \hat{E}^+ \psi^* \cdot \psi \right] dV. \quad (4.48)$$

Действительно, как было показано выше, общий вид волновой функции частицы, взаимодействующей со стационарным внешним электромагнитным полем, определяется выражением

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n u_n(\mathbf{r}) \exp(-i\omega_n t),$$

и для энергии частицы получаем

$$E_p = \sum_n E_n |a_n|^2,$$

где E_n определяется выражением (4.45).

Итак, плотность энергии материального поля определяется выражением (4.47), которое отличается от слагаемого w_2 функции Га-

мильтона (4.29) последним слагаемым в (4.46), являющимся полной дивергенцией:

$$w_2(\mathbf{r}, t) = w_p(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla(\psi^* \cdot \nabla\psi + \nabla\psi^* \cdot \psi). \quad (4.49)$$

Соотношение (4.45) определяет связь энергии частицы E_n в состоянии с волновой функцией $u_n(\mathbf{r})$ с собственными значениями $\hbar\omega_n$ краевой задачи (4.14). До сих пор мы использовали лишь первое из соотношений (4.42)–(4.43). Наглядную интерпретацию физического смысла энергии частицы E_n дает соотношение (4.43). Действительно, интегрируя по бесконечному объему обе части соотношения (4.43) для частицы, находящейся в состоянии с волновой функцией (4.44), получаем

$$E_n = \frac{1}{m_0} \int u_n^*(\mathbf{r}) \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] u_n(\mathbf{r}) dV + \int U_0(\mathbf{r}) \rho_n(\mathbf{r}) dV. \quad (4.50)$$

Второе слагаемое в получившемся выражении определяет потенциальную энергию частицы во внешнем электростатическом поле. Следовательно, основываясь на аналогии с соотношениями классической физики, первое слагаемое определяет кинетическую энергию движения частицы. На первый взгляд, это соотношение отличается от традиционного выражения для кинетической энергии частицы. Однако это связано с тем, что оператор $i\hbar \partial/\partial t$ в рамках релятивистской теории выполняет двойную функцию. С одной стороны, как мы говорили выше, он определяет временную компоненту 4-вектора плотности потока $\rho(\mathbf{r}, t)$. С другой стороны, квантово-механическое среднее этого оператора, понимаемое в смысле (4.48) (или в символической записи $\int \hat{E} \rho dV$), определяет энергию частицы. Например, в случае свободной частицы получаем

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{p}} &= \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4} \frac{1}{m_0 c^2} \int u_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) dV = \\ &= \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \end{aligned}$$

Как видно, это слагаемое включает и массу покоя частицы. В принципе, массу покоя частицы можно выделить в качестве отдельного слагаемого. Однако, как мы увидим позже (см. подробнее раздел 6.4), масса покоя в рамках релятивистской теории может изменяться, поэтому такое разделение не является целесообразным.¹⁾

Отметим, что выражение (4.50) может быть получено и непосредственно из уравнения (4.14). Действительно, умножим обе части

¹⁾ Отметим, что и в классической релятивистской механике под кинетической энергией также понимается энергия, включающая массу покоя частицы.

уравнения (4.14) на $u_n^*(\mathbf{r})$ и проинтегрируем по объему, в результате получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0} \int u_n^*(\mathbf{r}) \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] u_n(\mathbf{r}) dV - \\ - \frac{\hbar \omega_n}{2m_0 c^2} \int u_n^*(\mathbf{r}) (\hbar \omega_n - U_0(\mathbf{r})) u_n(\mathbf{r}) dV + \\ + \frac{1}{2m_0 c^2} \int U_0(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}) (\hbar \omega_n - U_0(\mathbf{r})) u_n(\mathbf{r}) dV = 0. \end{aligned}$$

Учитывая условие нормировки волновых функций (4.21), отсюда следует выражение (4.50).

Приведенные выше преобразования позволили нам раскрыть физический смысл слагаемых функции Гамильтона (4.29). Выделив из w_1 плотность энергии электромагнитного поля w_f , мы свели уравнение (4.32) для функции w_1 к уравнению Пойнтинга (4.38). Воспользуемся аналогичным приемом по отношению к уравнению (4.39). Используя уравнение непрерывности (4.5), получаем

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rho = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t} (\varphi \rho) + \varphi \operatorname{div} \mathbf{j} = \mathbf{E} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t} (\varphi \rho) + \operatorname{div} (\varphi \mathbf{j}).$$

Подставляя это выражение в (4.39), получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_2}{\partial t} = \mathbf{E} \mathbf{j}_e + \frac{\partial}{\partial t} (q_0 \varphi \rho) + \\ + \operatorname{div} \left\{ \frac{1}{2m_0} \left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + q_0 \varphi \right) \psi^* \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right) \psi \right] \right\}. \quad (4.51) \end{aligned}$$

Сумма выражений (4.37) и (4.51) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{c}{4\pi} \operatorname{div} [\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}] + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} (\varphi \mathbf{E}) - \\ - \operatorname{div} \left\{ \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right) \psi^* \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi - \right. \right. \\ \left. \left. - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right) \psi \right] \right\}, \quad (4.52) \end{aligned}$$

где H — функция Гамильтона, определяющаяся выражением (4.29) и имеющая, согласно (4.36) и (4.49), следующий вид:

$$\begin{aligned} H = w_1 + w_2 = w_{em} + w_p - q_0 \varphi \rho + \\ + \frac{1}{4\pi} \operatorname{div} (\varphi \mathbf{E}) + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla (\psi^* \cdot \nabla \psi + \nabla \psi^* \cdot \psi). \quad (4.53) \end{aligned}$$

Подставляя (4.53) в (4.52), получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{em} + w_p - q_0 \varphi \rho) = -\frac{c}{4\pi} \operatorname{div} [\mathbf{E} \mathbf{B}] - \operatorname{div} \mathbf{J}, \quad (4.54)$$

где \mathbf{J} определяется выражением

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0\varphi \right) \psi^* \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi - \right. \\ \left. - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0\varphi \right) \psi \right] + \frac{\hbar^2}{4m_0} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \cdot \nabla \psi + \nabla \psi^* \cdot \psi).$$

Интегрируя обе части уравнения (4.54) по пространственному объему V , получаем

$$\frac{d}{dt} \int_V (w_{em} + w_p - q_0\varphi\rho) dV = -\frac{c}{4\pi} \oint_S [\mathbf{E}\mathbf{B}] d\mathbf{S} - \oint_S \mathbf{J} d\mathbf{S},$$

где S — поверхность, ограничивающая объем V . Следовательно, если поток энергии электромагнитного $\frac{c}{4\pi} \oint_S [\mathbf{E}\mathbf{B}] d\mathbf{S}$ и материального $\oint_S \mathbf{J} d\mathbf{S}$ полей через границу рассматриваемого объема равен нулю, то сохраняющейся величиной является полная энергия в объеме V :

$$E(t) = \int_V (w_{em} + w_p - q_0\varphi\rho) dV = \text{const}. \quad (4.55)$$

Поскольку энергия частицы $E_p = \int_V w_p dV$ является суммой кинетической энергии движения частицы и ее потенциальной энергии во внешнем поле, то из (4.55) следует, что интегралом движения является сумма энергии поля и кинетической энергии движения частицы. Остановимся на этом более подробно. Используя (4.43), для полной энергии получаем

$$E(t) = \int_V w_{em}(t) dV + \int_V (\psi^* \cdot K\psi + K^+ \psi^* \cdot \psi) dV + \\ + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \frac{d}{dt} \int_V \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dV, \quad (4.56)$$

т. е. полная энергия является суммой энергии электромагнитного поля в объеме V

$$E_{em} = \int_V w_{em} dV,$$

кинетической энергии движения частицы

$$E_K = \int_V (\psi^* \cdot K\psi + K^+ \psi^* \cdot \psi) dV$$

и обменной энергии

$$E_{ex}(t) = \frac{\hbar^2}{4m_0c^2} \int_V \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dV.$$

Для того чтобы пояснить смысл термина «обменная энергия» воспользуемся разложением волновой функции по собственным функциям краевой задачи (4.14), тогда

$$\begin{aligned} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi = \\ = i \sum_{n,m} a_n^*(t) a_m(t) \int_V u_n^*(\mathbf{r}) (\omega_n - \omega_m) u_m(\mathbf{r}) dV \exp [i (\omega_n - \omega_m) t]. \end{aligned}$$

Если частица находится в одном из собственных состояний $u_n(\mathbf{r})$ и не взаимодействует с электромагнитным полем, то сумма энергии электромагнитного поля и кинетической энергии движения частицы остается неизменной. Если частица в процессе взаимодействия с электромагнитным полем переходит из начального состояния n_i в момент времени t_i в конечное состояние n_f в момент времени t_f , то

$$E_{ex}(t_f) - E_{ex}(t_i) = 0.$$

Следовательно, сумма энергии поля и кинетической энергии движения частицы в начальный момент времени равна величине указанной суммы в конечный момент времени. Однако величина $E_{ex}(t)$ на интервале времени $\Delta t = t_f - t_i$ принимает ненулевые значения, что приводит к обмену энергией между электромагнитным полем и частицей. Энергия электромагнитного поля в течение указанного промежутка времени изменяется на величину, равную изменению кинетической энергии движения частицы. Указанные закономерности находятся в соответствии с закономерностями классической электродинамики, согласно которым сумма энергии поля и кинетической энергии движения частиц является интегралом движения.

4.1.4. Отрицательная вероятность. Приведенное обсуждение показывает, что аппарат релятивистской квантовой механики существенно отличается от аппарата нерелятивистской теории. Один из наглядных примеров состоит, например, в том, что временная компонента 4-вектора плотности потока, играющая роль плотности вероятности, не является положительно определенной величиной. Согласуется ли математический аппарат релятивистской квантовой механики с общепринятыми представлениями?

Уравнение (4.3) для зарядово-сопряженной частицы ($q_0 \rightarrow -q_0$) имеет вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + q_0 \varphi(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi_C(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4.57)$$

Как следует из (4.57), под зарядово-сопряженной частицей мы понимаем материальный объект, который обладает теми же инерционными свойствами, что и частицы, т. е. массой m_0 , и имеет противоположный заряд $-q_0$. Существование таких дуальных объектов предсказывается симметриями, присущими полной группе преобразований Лоренца.

Несложно видеть, что уравнение (4.57) совпадает с уравнением для комплексно сопряженной волновой функции уравнения (4.3). Следовательно, между решениями уравнения (4.3) и решениями уравнения (4.57) существует взаимно-однозначная связь, определяемая соотношением

$$\psi_C(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (4.58)$$

Мы не будем пока обсуждать вопрос, являются ли уравнения (4.3) и (4.57) уравнениями различных скалярных материальных полей или же эти поля, ввиду наличия связи (4.58), являются различными состояниями одного и того же материального поля. Ответ на этот вопрос будет получен позже на основе анализа свойств симметрии уравнения КГФ относительно CPT преобразований.

Краевая задача (4.14) для зарядово-сопряженной частицы принимает вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 - \frac{1}{c^2} (E_{Cn} + U_0(\mathbf{r}))^2 + m_0^2 c^2 \right] v_n(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.59)$$

т. е. мы полагаем, что зарядово-сопряженная частица взаимодействует с тем же самым стационарным электромагнитным полем $A_\mu(x) = A_\mu^{(0)}(\mathbf{r})$. Естественно, что решения краевой задачи (4.59) отличаются от решений краевой задачи (4.14), поскольку, например, если потенциал $\varphi_0(\mathbf{r})$ является притягивающим для частицы, то он является отталкивающим для зарядово-сопряженной частицы. Рассчитав спектр собственных состояний краевой задачи (4.59), мы можем представить волновую функцию уравнения (4.57) в виде разложения

$$\psi_C(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{n}} \left[a_{\mathbf{n}}^{(+)} v_{\mathbf{n}}^{(+)}(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_{C\mathbf{n}}^{(+)}}{\hbar} t\right) + a_{\mathbf{n}}^{(-)} v_{\mathbf{n}}^{(-)}(\mathbf{r}) \exp\left(i \frac{E_{C\mathbf{n}}^{(-)}}{\hbar} t\right) \right].$$

С другой стороны, используя (4.58), получаем

$$\begin{aligned} \psi_C(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{n}} \left[a_{\mathbf{n}}^{(-)*} u_{\mathbf{n}}^{(-)*}(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_{\mathbf{n}}^{(-)}}{\hbar} t\right) + \right. \\ \left. + a_{\mathbf{n}}^{(+)*} u_{\mathbf{n}}^{(+)*}(\mathbf{r}) \exp\left(i \frac{E_{\mathbf{n}}^{(+)}}{\hbar} t\right) \right]. \quad (4.60) \end{aligned}$$

Учитывая, что два слагаемых в (4.60) являются двумя линейно независимыми решениями уравнения (4.57) с $A_\mu(x) = A_\mu^{(0)}(\mathbf{r})$, несложно видеть, что отрицательно частотные решения краевой задачи (4.14)

однозначно связаны с положительно частотными решениями краевой задачи (4.59):

$$\psi_{C\mathbf{n}}^{(+)} = \psi_{\mathbf{n}}^{(-)*},$$

где

$$\psi_{C\mathbf{n}}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = v_{\mathbf{n}}^{(+)}(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_{C\mathbf{n}}^{(+)} t}{\hbar}\right), \quad \psi_{\mathbf{n}}^{(-)}(\mathbf{r}, t) = u_{\mathbf{n}}^{(-)}(\mathbf{r}) \exp\left(i \frac{E_{\mathbf{n}}^{(-)} t}{\hbar}\right).$$

Следовательно, отрицательно частотный спектр собственных значений $E_{\mathbf{n}}^{(-)}$ краевой задачи (4.14) совпадает с положительно частотным спектром собственных значений $E_{C\mathbf{n}}^{(+)}$ краевой задачи (4.59), а собственные волновые функции указанных двух краевых задач связаны соотношением $u_{\mathbf{n}}^{(-)} = v_{\mathbf{n}}^{(+)*}$.

Временная компонента 4-вектора плотности потока в случае частицы, подчиняющейся уравнению (4.3), определяется выражением (4.6). Для зарядово-сопряженной частицы, подчиняющейся уравнению (4.57), эта компонента имеет вид

$$\rho_C(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m_0 c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \psi_C^*}{\partial t} \psi_C - \psi_C^* \frac{\partial \psi_C}{\partial t} \right) + q_0 \psi_C^* \varphi \psi_C \right].$$

Подставляя сюда (4.58), получаем

$$\rho_C(\mathbf{r}, t) = -\rho(\mathbf{r}, t). \quad (4.61)$$

Формула (4.61) закладывает основы интерпретации свойств волновой функции в рамках релятивистских теорий и служит определением отрицательной вероятности.

Уравнения для волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ и комплексно сопряженной волновой функции $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ совпадают только в том случае, когда $q_0 = 0$. Следовательно, в то время как волновая функция нейтральной частицы может быть действительной или чисто мнимой, волновая функция частицы, обладающей зарядом, может быть только комплексной. В случае свободной частицы положительно частотным решениям краевой задачи (4.14) соответствует положительная плотность вероятности, а отрицательно частотным решениям соответствует отрицательная плотность вероятности, указывающая на то, что заряд частицы в этих двух состояниях противоположен. Это дает основания связать состояния, описываемые волновой функцией $\psi_{\mathbf{n}}^{(+)}(\mathbf{r}, t)$, с состояниями частицы или «положительной частицы», а состояния, описываемые волновой функцией $\psi_{\mathbf{n}}^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ с состояниями «отрицательной частицы». Учитывая традиции, сложившиеся в квантовой электродинамике, возникает естественное желание связать состояния «отрицательной частицы» с состояниями античастицы. Однако стандартная модель квантовой электродинамики базируется на уравнении первого порядка по временной производной, в этом случае отрицательно частотные решения с неизбежностью являются решениями уравнения для сопряженной волновой функции. В случае скалярного поля сопряженная

волновая функция является комплексно сопряженной. Однако решения уравнения (4.57) мы связали с зарядово-сопряженной частицей. Следует отметить, что физические свойства частиц проявляются лишь в их взаимодействиях с внешними полями, поэтому решения задачи о движении свободной частицы вряд ли могут служить надежным базисом для последовательной классификации состояний материального поля. В силу сказанного в предисловии к настоящей главе становится ясно, что впоследствии мы свяжем состояния отрицательных частиц с состояниями зеркальных частиц. Однако зеркальность свойств положительных и отрицательных частиц может быть проиллюстрирована лишь на примере решения задач о движении частицы во внешнем поле, пока мы не перешли к обсуждению указанных задач, мы вынуждены использовать такую, может быть излишне усложненную, терминологию.¹⁾

Как следует из формулы (4.15), в случае свободной частицы положительно частотные собственные значения являются положительными числами, а отрицательно частотные — отрицательными. Однако положительно частотные собственные значения $E_{\mathbf{n}}^{(+)}$ общей краевой задачи (4.14) о движении частицы в произвольных стационарных внешних полях не обязательно являются положительными числами, а отрицательно частотные $E_{\mathbf{n}}^{(-)}$ — отрицательными числами. Это можно продемонстрировать уже на примере свободной частицы. Действительно, согласно принципу градиентной инвариантности изменение потенциалов поля на постоянную величину не приводит к изменению значений наблюдаемых величин, поэтому частица, движущаяся в области пространства $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_0 = \text{const}$, ведет себя как свободная. Однако ее собственные значения определяются теперь выражением $E_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = q_0\varphi_0 \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$. Как видно, при отрицательной величине $U_0 = q_0\varphi_0$ положительно частотные собственные значения могут быть отрицательными числами.

Использование понятия отрицательной вероятности приводит к принципиально важным закономерностям, определяющим связь начального и конечного состояний частиц материального поля в процессах их взаимодействия с внешними полями. Пусть частица, находящаяся в начальный момент времени в одном из собственных состояний, определяемых решением стационарной краевой задачи (4.14), взаимодействует с импульсным внешним полем $A_{\mu}^{(e)}(\mathbf{r}, t)$, т. е. таким, что $A_{\mu}^{(e)}(\mathbf{r}, t_2) = A_{\mu}^{(e)}(\mathbf{r}, t_1) = 0$, где моменты времени t_1 и t_2 определяют начало и конец импульса соответственно. Фундамен-

¹⁾ Термин «положительная частица» является сокращением от полного термина «частица, описываемая положительно частотным решением». Во избежание недоразумений отметим, что этот термин не подразумевает, что заряд положительной частицы является положительным, поскольку материальная константа q_0 в уравнении (4.3) может иметь произвольный знак.

тальным физическим принципом является закон сохранения заряда, поскольку на сегодняшний день не обнаружено процессов, которые противоречили бы этому закону. Математическая формулировка закона сохранения заряда непосредственно связана с уравнением непрерывности. Действительно, интегрируя уравнение непрерывности по четырехмерному объему $\Omega = Vc(t_2 - t_1)$, получаем

$$\int_V \rho(\mathbf{r}, t_2) dV - \int_V \rho(\mathbf{r}, t_1) dV = - \int_{t_1}^{t_2} \oint_S \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{S},$$

где S — поверхность, ограничивающая объем V трехмерного пространства. Если мы устремим $V \rightarrow \infty$ и положим, что по окончании взаимодействия частица по-прежнему находится в суперпозиции связанных состояний краевой задачи (4.14), то поверхностный интеграл в правой части последнего выражения обратится в нуль. Откуда следует закон сохранения заряда

$$\int_V \rho(\mathbf{r}, t_2) dV = \int_V \rho(\mathbf{r}, t_1) dV,$$

где

$$\int \rho(\mathbf{r}, t) dV = \sum_{\mathbf{n}} \left[|a_{\mathbf{n}}^{(+)}(t)|^2 \frac{1}{m_0 c^2} \int u_{\mathbf{n}}^{(+)*} (E_{\mathbf{n}}^{(+)} - q_0 \varphi) u_{\mathbf{n}}^{(+)} dV - |a_{\mathbf{n}}^{(-)}(t)|^2 \frac{1}{m_0 c^2} \int u_{\mathbf{n}}^{(-)*} (E_{\mathbf{n}}^{(-)} + q_0 \varphi) u_{\mathbf{n}}^{(-)} dV \right]. \quad (4.62)$$

Учитывая условие нормировки волновых функций, получаем

$$\sum_{\mathbf{n}} \left(|a_{\mathbf{n}}^{(+)}(t_2)|^2 - |a_{\mathbf{n}}^{(-)}(t_2)|^2 \right) = \sum_{\mathbf{n}} \left(|a_{\mathbf{n}}^{(+)}(t_1)|^2 - |a_{\mathbf{n}}^{(-)}(t_1)|^2 \right). \quad (4.63)$$

Как и в нерелятивистской квантовой механике, величина $|a_{\mathbf{n}}^{(+)}(t)|^2$ имеет смысл вероятности заселения уровня (или населенности состояния), характеризуемого квантовыми числами $n = (\mathbf{n}, \lambda)$. Учитывая, что процессы измерения в микромире носят принципиально статистический характер, мы можем ввести число положительных

$$N^{(+)}(t) = \sum_{\mathbf{n}} |a_{\mathbf{n}}^{(+)}(t)|^2$$

и отрицательных частиц

$$N^{(-)}(t) = \sum_{\mathbf{n}} |a_{\mathbf{n}}^{(-)}(t)|^2.$$

Из (4.63) следует закон изменения числа частиц

$$N^{(+)}(t_2) - N^{(-)}(t_2) = N^{(+)}(t_1) - N^{(-)}(t_1).$$

Как видно, сохраняющейся величиной является не сумма числа положительных и отрицательных частиц, а их разность, которая и обеспечивает сохранение суммарного заряда системы. Действительно, полагая, что в начальный момент времени частица находится в положительном частотном состоянии, и умножая обе стороны равенства (4.63) на единичный заряд q_0 , получаем: $q_0 N^{(+)}(t_2) - q_0 N^{(-)}(t_2) = q_0$.

Итак, использование понятия отрицательной вероятности дает наглядную физическую интерпретацию положительно и отрицательно частотным решениям уравнения (4.3). Эти два линейно независимых решения отвечают двум состояниям материального поля, характеризующимся одинаковой массой и противоположным зарядом. Очевидно, что эти два состояния материального поля обладают различными физическими свойствами. Принципиально важным является тот факт, что общее решение уравнения (4.3) является суперпозицией указанных двух решений. Следовательно, уже в рамках уравнения (4.3) заложена возможность описания процессов с изменением числа частиц, несмотря на то что волновая функция, являющаяся решением этого уравнения, зависит лишь от одного пространственного вектора \mathbf{r} , т. е. уравнение, казалось бы, является одночастичным по своей природе.

4.2. Операторы

Базовым инструментом в квантовой механике, наряду с понятием волновой функции, является также и понятие оператора. Согласно общему определению, операторы осуществляют преобразование волновой функции частицы, при этом преобразованная волновая функция должна относиться к тому же пространству, что и исходная, т. е. оператор осуществляет преобразование гильбертова пространства волновых функций в себя. Операторы основных физически наблюдаемых величин являются генераторами преобразований симметрии, т. е. осуществляют представление группы преобразований Лоренца.

Квантово-механическим операторам ставятся в соответствие наблюдаемые значения. Наблюдаемые значения λ являются решениями уравнения на собственные значения $\hat{L}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$. В рамках теорий, линейных по оператору p_4 , квантово-механическое среднее оператора в состоянии с произвольной волновой функцией определяется пространственным интегралом:

$$\langle \hat{L} \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV. \quad (4.64)$$

Представляя волновую функцию в виде разложения по полному ортонормированному базису собственных функций $\psi = \sum_n a_n \psi_n$, где ψ_n —

собственная функция, отвечающая собственному значению l_n , для квантово-механического среднего получаем

$$\langle \widehat{L} \rangle = \sum_n l_n |a_n|^2. \quad (4.65)$$

Полученное соотношение является следствием условия ортонормированности собственных волновых функций, которое в рамках уравнений, линейных по оператору p_4 , имеет вид: $\int \psi_n^* \psi_m dV = \delta_{nm}$. Таким образом, квантово-механическое среднее есть сумма произведений собственных значений оператора l_n в состоянии с волновой функцией ψ_n , умноженных на вероятность нахождения частицы в указанном состоянии $|a_n|^2$.

4.2.1. Билинейные комбинации. Выражение для квантово-механического среднего можно записать в следующем символическом виде: $\langle \widehat{L} \rangle = \int \widehat{L} \rho dV$, где $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ — плотность вероятности. В рамках уравнений, квадратичных по оператору p_4 , плотность вероятности определяется выражением (4.6), поэтому выражения для квантово-механических средних будут отличаться от (4.64). Вместе с тем билинейные комбинации волновой функции и сопряженной волновой функции вида $\psi^* \widehat{L} \psi$ по-прежнему играют важную роль в аппарате теории. Действительно, примером такой билинейной комбинации является 4-вектор плотности тока:

$$j_\mu^{(e)}(x) = \frac{q_0}{2m_0} (P_\mu^+ \psi^* \cdot \psi + \psi^* \cdot P_\mu \psi),$$

где $P_\mu = p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu$. Отметим, что 4-вектор плотности тока $j_\mu^{(e)}$ связан с 4-вектором плотности потока материального поля j_μ , компоненты которого определяются соотношениями (4.6)–(4.7), соотношением $j_\mu^{(e)} = q_0 j_\mu$. Как видно из уравнения (3.39), именно 4-вектор плотности тока $j_\mu^{(e)}(\mathbf{r}, t)$ входит в правую часть уравнений для поля, т. е. определяет напряженности электрического и магнитного полей, создаваемых частицей, находящейся в состоянии с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, t)$.

4.2.2. Сохраняющиеся величины. Особую роль в квантовой механике играют операторы, отвечающие сохраняющимся величинам. В рамках теорий, основанных на уравнениях, линейных по оператору p_4 , сохраняющимся величинам отвечают операторы, не зависящие явно от времени и коммутирующие с гамильтонианом. Квантово-механические средние таких величин не зависят от времени. Обсудим специфику сохраняющихся величин для уравнений, квадратичных по оператору p_4 .

Несложно видеть, что если оператор \widehat{L} коммутирует с оператором (4.4), имеющим вид

$$\widehat{Z} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right)^2 + m_0^2 c^2 \right],$$

то волновая функция $\psi' = \widehat{L}\psi$ также является решением уравнения (4.3). Поэтому если оператор \widehat{L} коммутирует с оператором уравнения (4.14), то волновая функция

$$\psi'_n(\mathbf{r}, t) = \widehat{L}\psi_n(\mathbf{r}, t)$$

также является решением задачи на собственные значения (4.14), отвечающим тому же собственному значению, что и $\psi_n(\mathbf{r}, t) = u_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t/\hbar)$. Ввиду ортонормированности собственных волновых функций краевой задачи (4.14) волновая функция $\psi'_n(\mathbf{r}, t)$ может отличаться от волновой функции $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ лишь коэффициентом:

$$\psi'_n(\mathbf{r}, t) = \widehat{L}\psi_n(\mathbf{r}, t) = l_n \psi_n(\mathbf{r}, t).$$

Таким образом, если оператор \widehat{L} коммутирует с оператором уравнения (4.14), то волновая функция ψ_n является одновременно собственной функцией указанной краевой задачи, отвечающей собственному значению E_n , и собственной функцией оператора \widehat{L} , отвечающей собственному значению l_n .

Запишем уравнение (4.3) в виде

$$\widehat{Z}\psi = \left(\widehat{K} - \widehat{T} \right) \psi = 0,$$

где

$$\widehat{K} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m_0^2 c^2 \right], \quad \widehat{T} = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right)^2.$$

Следовательно, уравнение (4.3) можно переписать в следующем виде:

$$\widehat{T}\psi = \widehat{K}\psi.$$

Подействуем на обе стороны указанного уравнения оператором \widehat{L} , тогда это уравнение примет вид

$$\widehat{L}\widehat{T}\psi = \widehat{L}\widehat{K}\psi. \quad (4.66)$$

Его можно преобразовать следующим образом:

$$\widehat{T}\widehat{L}\psi = \widehat{L}\widehat{K}\psi - \left[\widehat{L}, \widehat{T} \right] \psi.$$

Уравнение для сопряженной волновой функции ψ^* имеет вид

$$\widehat{T}^+ \psi^* = \widehat{K}^+ \psi^*, \quad (4.67)$$

где \widehat{Z}^+ — эрмитово-сопряженный оператор. Умножая уравнение (4.66) слева на ψ^* , а уравнение (4.67) справа на $\widehat{L}\psi$ и вычитая затем из первого уравнения второе, получаем

$$\psi^* \cdot \widehat{T}\widehat{L}\psi - \widehat{T}^+\psi^* \cdot \widehat{L}\psi = \psi^* \cdot \widehat{L}\widehat{K}\psi - \widehat{K}^+\psi^* \cdot \widehat{L}\psi - \psi^* \cdot [\widehat{L}, \widehat{T}]\psi. \quad (4.68)$$

Напомним, что мы используем обозначение, согласно которому оператор действует лишь на волновую функцию, находящуюся по одну с ним сторону от точки.

Введем для краткости записи вспомогательный оператор $\widehat{\theta}$:

$$\widehat{\theta} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0\varphi.$$

Тогда левую часть последнего соотношения можно преобразовать к следующему виду:

$$\begin{aligned} \psi^* \cdot \widehat{\theta}\widehat{\theta}\widehat{L}\psi - \widehat{\theta}^+\widehat{\theta}^+\psi^* \cdot \widehat{L}\psi &= \\ &= i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \widehat{\theta}\widehat{L}\psi}{\partial t} + \frac{\partial \widehat{\theta}^+\psi^*}{\partial t} \widehat{L}\psi \right) - q_0\varphi \left(\psi^* \cdot \widehat{\theta}\widehat{L}\psi - \widehat{\theta}^+\psi^* \cdot \widehat{L}\psi \right) = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\widehat{\theta}^+\psi^* \cdot \widehat{L}\psi + \psi^* \cdot \widehat{\theta}\widehat{L}\psi \right). \end{aligned}$$

В свою очередь правую часть соотношения (4.68) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi^* \cdot \widehat{L}\widehat{K}\psi - \widehat{K}^+\psi^* \cdot \widehat{L}\psi - \psi^* \cdot [\widehat{L}, \widehat{T}]\psi &= \\ &= \psi^* \cdot [\widehat{L}, \widehat{Z}]\psi + \frac{i\hbar}{2m_0} \operatorname{div} \left[\psi^* \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \widehat{L}\psi - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \widehat{L}\psi \right], \end{aligned}$$

где \widehat{Z} — оператор уравнения (4.3). Интегрируя затем обе части уравнения по бесконечному пространственному объему и полагая, что интеграл от дивергенции равен нулю, окончательно получаем

$$\frac{i\hbar}{2m_0c^2} \frac{d}{dt} \int \left(\widehat{\theta}^+\psi^* \cdot \widehat{L}\psi + \psi^* \cdot \widehat{\theta}\widehat{L}\psi \right) dV = \int \psi^* \cdot [\widehat{L}, \widehat{Z}]\psi dV. \quad (4.69)$$

Действуя теперь на обе стороны уравнения (4.67) оператором \widehat{L}^+ и проводя преобразования, аналогичные вышеприведенным, получаем

$$\frac{i\hbar}{2m_0c^2} \frac{d}{dt} \int \left(\widehat{\theta}^+\widehat{L}^+\psi^* \cdot \psi + \widehat{L}^+\psi^* \cdot \widehat{\theta}\psi \right) dV = \int [\widehat{Z}^+, \widehat{L}^+]\psi^* \cdot \psi dV. \quad (4.70)$$

Из (4.69) и (4.70) следует, что если оператор \widehat{L} коммутирует с оператором \widehat{Z} уравнения (4.3):

$$\widehat{L}\widehat{Z} - \widehat{Z}\widehat{L} = 0,$$

то сохраняющейся является следующая величина:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \widehat{L}\psi - \psi^* \frac{\partial\widehat{L}\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi\psi^* \widehat{L}\psi \right] dV + \\ & + \frac{1}{2m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial\widehat{L}^+\psi^*}{\partial t} \psi - \widehat{L}^+\psi^* \cdot \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi\widehat{L}^+\psi^* \cdot \psi \right] dV = \text{const.} \end{aligned} \quad (4.71)$$

В частном случае, когда оператор \widehat{L} является тождественным оператором: $\widehat{L} = q_0\widehat{I}$, сохраняющейся величиной является электрический заряд. В случае когда оператор $\widehat{L} = \widehat{E} = i\hbar \partial/\partial t$, последнее выражение совпадает с выражением (4.48) для энергии частицы.

Пусть волновая функция является суперпозицией собственных функций:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right).$$

Учитывая условие ортонормированности волновых функций (4.21), для сохраняющейся величины (4.71) получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \widehat{L}\psi - \psi^* \frac{\partial\widehat{L}\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi\psi^* \widehat{L}\psi \right] dV + \\ & + \frac{1}{2m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial\widehat{L}^+\psi^*}{\partial t} \psi - \widehat{L}^+\psi^* \cdot \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) - q_0\varphi\widehat{L}^+\psi^* \cdot \psi \right] dV = \\ & = \sum_n l_n |a_n|^2 = \langle \widehat{L} \rangle. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Таким образом, сохраняющейся величиной является квантово-механическое среднее оператора \widehat{L} , определяемое, так же как и в случае уравнений, линейных по оператору p_4 , соотношением (4.65).

4.3. Свободная частица

В предыдущих разделах мы показали, что математический аппарат релятивистской квантовой механики существенно отличается от аппарата нерелятивистской теории, что приводит к изменению представлений о физическом смысле операторов, используемых в рамках этих теорий, и самой волновой функции. Указанные отличия неизбежно приводят к изменению представлений о структуре и свойствах частиц и самого понятия частицы. Базируясь на математических свойствах уравнения (4.3), мы уже вкратце обсудили выше возникающие отличия. Настоящий раздел будет посвящен иллюстрации указанных отличий на примере модели свободной частицы. Модель свободной частицы является одной из простейших моделей квантовой механики, поэтому эта модель имеет как достоинства, так и недостатки. Недостатки этой модели состоят в том, что реальные свойства частиц проявляются

лишь в их взаимодействии друг с другом либо с внешними полями. Достоинства же состоят в том, что простота модели позволяет легко обобщить полученные результаты на случай более реалистичного начального состояния частицы, представляющего собой волновой пакет, т. е. пространственно локализованное состояние частицы. Уравнение КГФ относится к классу волновых уравнений с пространственной дисперсией, поскольку зависимость волнового вектора от частоты (или энергии) частицы не является в этом случае линейной. Ниже мы напомним вкратце основные методы, используемые для описания распространения пространственно ограниченных волновых пакетов в средах с пространственной дисперсией.

4.3.1. Линейно независимые решения. Рассмотрим одномерное движение свободной частицы. Уравнение (4.3) принимает в этом случае вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\hbar^2 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + m_0^2 c^2 \right] \psi(z, t) = 0. \quad (4.73)$$

Поскольку уравнение (4.73) является уравнением в частных производных второго порядка как по времени, так и по пространственной переменной, то при заданной величине энергии частицы E оно имеет четыре линейно независимых решения, в качестве которых можно выбрать, например, следующие:

$$u_E^{(1)}(z, t) = \exp\left(-i \frac{Et - pz}{\hbar}\right), \quad u_E^{(2)}(z, t) = \exp\left(i \frac{Et - pz}{\hbar}\right), \quad (4.74a)$$

$$u_E^{(3)}(z, t) = \exp\left(-i \frac{Et + pz}{\hbar}\right), \quad u_E^{(4)}(z, t) = \exp\left(i \frac{Et + pz}{\hbar}\right), \quad (4.74b)$$

где энергия E и величина импульса p связаны хорошо известным соотношением

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (4.75)$$

Остановимся на решении $u_E^{(1)}$. Выделяя энергию покоя частицы (поскольку энергия (4.75) есть полная энергия, включающая, в том числе, и энергию покоя частицы), получаем

$$u_E^{(1)}(z, t) = \exp\left(-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t\right) \exp\left[-i \frac{(E - m_0 c^2) t - pz}{\hbar}\right],$$

т. е. решение $u_E^{(1)}$ соответствует плоской волне, движущейся в положительном направлении оси z , с фазовой скоростью

$$\nu_p = \frac{E - m_0 c^2}{p} = c \sqrt{\frac{E - m_0 c^2}{E + m_0 c^2}}. \quad (4.76)$$

Несложно видеть, что решения (4.74а) соответствуют волнам, распространяющимся в положительном направлении оси z , а решения (4.74б) соответствуют волнам, распространяющимся им навстречу.

Следует отметить, что собственные волновые функции (4.74) не обращаются в нуль при $z \rightarrow \pm\infty$, в результате чего возникает необходимость подробнее остановиться на обсуждении условий ортогональности, при выводе которых мы полагали $u_n(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty} = 0$. Для связанных состояний частицы выполнение последнего условия обеспечивается граничными условиями краевой задачи. Собственные волновые функции, отвечающие непрерывным собственным значениям, могут иметь конечные значения во всех точках пространства. Интегрируя соотношение (4.19) по конечному объему V , вместо (4.20) получаем

$$\begin{aligned} \frac{E_n^2 - E_m^2}{2m_0c^2} \int_V u_n^*(\mathbf{r}, t) u_m(\mathbf{r}, t) dV = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \oint_S (u_n^* \cdot \nabla u_m - \nabla u_n^* \cdot u_m) d\mathbf{S}, \quad (4.77) \end{aligned}$$

где S — поверхность, ограничивающая объем V . Отметим, что в случае трехмерных плоских волн квантовое число n есть совокупность четырех квантовых чисел $n = (\mathbf{p}, \lambda)$, а собственная волновая функция имеет вид

$$u_n(\mathbf{r}, t) = C_n \exp\left(-i \frac{E_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right). \quad (4.78)$$

Поверхностный интеграл в правой части (4.77) определяет интегральный поток через поверхность, ограничивающую объем V . Состояние частицы, задаваемое в виде плоской волны, является модельным и неразрывно связано с понятием бесконечно большого пространственного объема. Пространственно локализованные состояния частиц задаются волновыми пакетами, являющимися суперпозицией плоских волн. Ввиду конечности скорости распространения волнового пакета для любого конечного времени наблюдения мы всегда можем выбрать очень большой, но конечный объем, в пределах которого находятся как исходная, так и все вновь появившиеся частицы. В этом случае $\oint_S \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0$. Обращения в нуль потока через границы интересующего нас конечного пространственного объема V можно достичь несколькими способами. Во-первых, можно положить, что рассматриваемый объем ограничен абсолютно непроницаемыми стенками. В этом случае квантовое число \mathbf{p} становится дискретным. Однако при стремлении величины объема к бесконечности разность энергий двух соседних уровней стремится к нулю, т. е. спектр становится квазинепрерывным. Волновые функции дискретных состояний являются в этом случае суперпозицией двух встречных плоских волн. Например, в одномерном случае волновая функция $u_n(z) = C_n \sin(\pi n z/L)$ обеспечивает нуле-

вые граничные условия в точках $z = 0$ и $z = L$. Чтобы сохранить экспоненциальный вид собственных волновых функций (4.78), можно воспользоваться периодическими граничными условиями $u(L) = u(0)$. Эти условия обеспечивают равенство нулю интегрального потока. Собственные значения импульса \mathbf{p} или волнового вектора $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ также являются дискретными и имеют вид

$$\mathbf{k}_n = \left\{ \frac{2\pi n_1}{L_1}, \frac{2\pi n_2}{L_2}, \frac{2\pi n_3}{L_3} \right\}, \quad (4.79)$$

где L_i — размеры объема в направлении осей \mathbf{e}_i , а n_i — целые числа. Так же как и в предыдущем случае, при стремлении $L_i \rightarrow \infty$ спектр становится квазинепрерывным.

В соответствии со сказанным выше, пространство состояний $(\mathbf{n}, E_{\mathbf{n}}^{(\lambda)})$ свободного скалярного материального поля можно представить в виде двух гиперплоскостей в четырехмерном пространстве, определяющих зависимость собственных значений $E_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}$ от пространственных квантовых чисел $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$:

$$E_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}.$$

Эти две гиперплоскости (или зоны состояний частицы в случае одномерного движения) представлены графически на рис. 4.1. Одна из зон отвечает положительно частотным решениям, а вторая — отрицательно частотным. Две зоны состояний частицы отделены друг от друга запрещенной зоной с энергетической шириной $\Delta E = 2m_0 c^2$.

Состояния материального поля, отвечающие четырем линейно независимым решениям (4.74) волнового уравнения, представляются точками 1, 2, 3, 4 на рис. 4.1. Точка 1 на рис. 4.1 соответствует состоянию частицы, описываемому волновой функцией $u_E^{(1)}$; как видно, частица в этом состоянии имеет положительную энергию и распространяется в положительном направлении оси z . Состояние частицы, изображаемой точкой 2 на рисунке, соответствует состоянию, описываемому волновой функцией $u_E^{(2)}$, т.е. имеет ту же по величине, но отрицательную энергию и распространяется в том же направлении, что и первая. При операции пространственной инверсии частица переходит из состояний, задаваемых точками 1 и 2, в состояния, задаваемые точками 3 и 4 с волновыми функциями $u_E^{(3)}$ и $u_E^{(4)}$ соответственно, для которых $\mathbf{p}_3 = -\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_4 = -\mathbf{p}_2$.

Итак, основная специфика структуры состояний свободной релятивистской частицы состоит в том, что она содержит две зоны состояний, соответствующие положительно и отрицательно частотным решениям. Эти две зоны состояний отделены друг от друга запрещенной зоной $\Delta E = 2m_0 c^2$ и соответствуют частицам, имеющим противоположный заряд, для идентификации которых мы ввели временно термины поло-

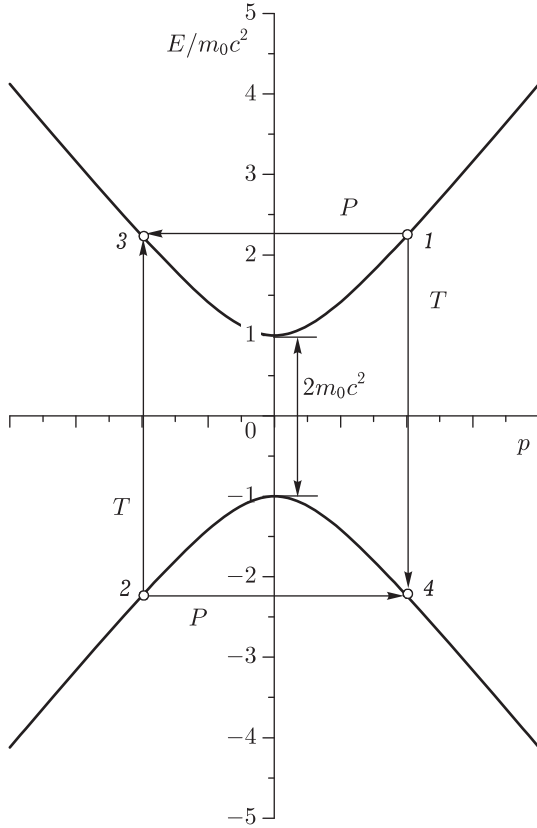


Рис. 4.1. Зоны положительно (верхняя кривая) и отрицательно (нижняя кривая) частотных состояний, являющиеся сечением гиперплоскостей в четырехмерном пространстве состояний, для случая одномерного движения частицы

жительная и отрицательная частица. Действительно, согласно (4.71) заряд частицы определяется следующим выражением:

$$q^{(i)} = \frac{q_0 E_n^{(i)}}{m_0 c^2} \int u_n^{(i)*}(\mathbf{r}) u_n^{(i)}(\mathbf{r}) dV.$$

Нормируя волновые функции $u_n^{(i)}(\mathbf{r})$, отвечающие собственным значениям (4.79), условием

$$\frac{|E_n^{(i)}|}{m_0 c^2} \int u_n^{(i)*} u_n^{(i)} dV = 1,$$

получаем

$$q^{(1,3)} = q_0, \quad q^{(2,4)} = -q_0, \quad (4.80)$$

поскольку $E_n^{(1,3)} > 0$, а $E_n^{(2,4)} < 0$. Плотность тока частицы в состоянии, задаваемом точкой 2, противоположна плотности тока частицы в состоянии 1, так как из (4.7) получаем: $\mathbf{j}^{(2)} = -\mathbf{j}^{(1)}$ (при том же знаке константы q_0). Это также свидетельствует о том, что заряды частиц, находящихся в состояниях 1 и 2, противоположны, поскольку частицам, движущимся в одном и том же направлении, но имеющим противоположный заряд, соответствует ток разного знака.

Отметим, что все четыре решения (4.74а, б) являются решениями одного и того же уравнения (4.73). В рамках волновых уравнений, линейных по оператору p_4 , отрицательно частотные решения либо не возникают, либо связываются с решением уравнения для сопряженной волновой функции. Как мы отмечали в предисловии к настоящей главе, одна из мотиваций перехода от волновых уравнений второго порядка к волновым уравнениям, включающим лишь первую временную производную, состоит в том, что величина отрицательно частотных собственных значений уменьшается с ростом величины импульса. Однако, как мы показали выше, энергия частицы в рамках релятивистской теории определяется выражением (4.45), которое в случае свободной частицы принимает вид

$$E = \frac{E_n^{(i)2}}{m_0 c^2} \int u_n^{(i)*}(\mathbf{r}) u_n^{(i)}(\mathbf{r}) dV,$$

т. е. является положительной как для положительно частотной, так и для отрицательно частотной зоны состояний.¹⁾

4.3.2. Волновые пакеты. При анализе задач рассеяния, т. е. задач о движении частицы с энергией, принадлежащей сплошному спектру состояний, состояние падающей частицы задается, как правило, в виде плоской волны. Однако состояния частиц в виде плоских волн в значительной мере являются математической идеализацией. Разложение волновой функции по плоским волнам приводит к необходимости интегрирования по бесконечному пространственному объему, что неизбежно связано с появлением расходящихся интегралов, например дельта-функции. Более удобными являются состояния, задаваемые в виде пространственно ограниченных волновых пакетов, поскольку в этом случае расходящихся интегралов не возникает, и, как результат, получаются строгие количественные соотношения между параметрами

¹⁾ В случае свободной частицы, говоря о положительно и отрицательно частотных решениях, мы имеем в виду знак фазы временных экспонент в (4.74). По сложившейся традиции положительно частотными называют решения вида $\exp(-iEt/\hbar)$. Однако поскольку E в этих формулах имеет размерность энергии, то, как мы отмечали выше, иногда бывает удобно говорить о собственных значениях краевых задач как об энергии состояния. В этом случае одна из двух гиперплоскостей $E_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}$ отвечает отрицательной энергии. В дальнейшем мы будем использовать, в основном, термин «отрицательно и положительно частотная зона», который позволит избежать недоразумений.

падающей и рассеянных частиц. Однако преимущества использования волновых пакетов не ограничиваются лишь соображениями удобства. Задание состояния частицы в виде волнового пакета приводит к появлению новой характеристики материального поля — групповой скорости. Как мы покажем в последующих главах, использование понятия групповой скорости позволяет дать наглядную физическую интерпретацию целого ряда явлений, придавая их описанию форму строгой математической теории.

В соответствии с результатами раздела 4.1.2, волновая функция частицы, энергия которой принадлежит непрерывному спектру состояний, имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int a(\mathbf{n}, t) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{n},$$

где $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t)$ — собственные волновые функции стационарной задачи, отвечающие собственному значению $E_{\mathbf{n}}$. Задавая начальное состояние частицы, т. е. $\psi(\mathbf{r}, 0)$ и $\partial\psi(\mathbf{r}, 0)/\partial t$, мы определяем

$$a(\mathbf{n}, 0) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{r}, 0) \left[\frac{1}{2} \left(i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}(\mathbf{r}, 0) + E_{\mathbf{n}}\psi(\mathbf{r}, 0) \right) - U\psi(\mathbf{r}, 0) \right] dV.$$

При решении стационарных задач рассеяния $a(\mathbf{n}, t) = a(\mathbf{n}, 0)$. В нестационарном случае мы должны решать уравнения для амплитуд (4.27). Для простоты изложения мы полагали, что спектр состояний падающего волнового пакета относится к одной гиперповерхности состояний, и потому использовали трехмерное квантовое число \mathbf{n} . Для свободной частицы, например,

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = C_{\mathbf{p}} \exp\left(i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r} - E(\mathbf{p})t}{\hbar}\right).$$

Падающий волновой пакет имеет, как правило, вид: $\psi(\mathbf{r}, 0) = f(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{p}_0\mathbf{r})$, где \mathbf{p}_0 — импульс падающей частицы, а $f(\mathbf{r})$ является пространственно локализованной функцией с характерным размером d . Тогда для свободной частицы получаем

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int a(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \exp\left(i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r} - E(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) d\mathbf{p}.$$

В случае $p_0 d \gg \hbar$ можно воспользоваться разложением

$$E(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p}_0) + \left. \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) + \dots$$

Как видно, характер пространственно-временной эволюции волнового пакета зависит от групповой скорости

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_0).$$

Следовательно, в то время как пространственно-временная эволюция материального поля в виде плоской волны определяется лишь фазовой

скоростью, определяемой соотношением (4.76), т. е. зависит лишь от $E(\mathbf{p}_0)$, характер эволюции волнового пакета зависит также и от наклона $\partial E/\partial \mathbf{p}$ гиперповерхности состояний в точке \mathbf{p}_0 .

При анализе стационарных задач рассеяния удобно воспользоваться эквивалентным альтернативным подходом. Проиллюстрируем его на примере одномерных задач рассеяния, для интерпретации решений которых в основном и будут использоваться состояния частиц в виде волновых пакетов. Пусть нам известны собственные решения одномерной краевой задачи (4.14) с $A_\mu(\mathbf{r}, t) = A_\mu(z)$. Поскольку уравнение (4.14) является уравнением второго порядка по пространственной производной, то каждому значению E отвечают два линейно независимых решения, например $u_E(z)$ и $v_E(z)$. Одно из них соответствует случаю, когда падающая частица распространяется слева направо, а второе — в противоположном направлении. Поскольку уравнение КГФ является линейным, то любая суперпозиция решений $u_E(z)$ с произвольными коэффициентами $a(E)$ также является решением указанной задачи. Следовательно, волновая функция

$$\psi(z, t) = \int a(\omega) u_\omega(z) \exp(-i\omega t) d\omega$$

является решением нестационарной краевой задачи с тем же потенциалом поля $A_\mu(z)$, где $\omega = E/\hbar$. Пусть нам известен временной профиль падающего волнового пакета в какой-либо точке z_0 :

$$\psi(z_0, t) = A(t) \exp(-i\omega_0 t), \quad (4.81)$$

тогда

$$a(\omega) = \frac{1}{2\pi u_\omega(z_0)} \int A(t) \exp[i(\omega - \omega_0)t] dt.$$

Как правило, потенциальная энергия при $z \rightarrow \pm\infty$ обращается в нуль или выходит на постоянное значение, поэтому удобно полагать, что точка z_0 находится в области пространства, где потенциальная энергия почти постоянна. При анализе одномерных задач рассеяния мы будем полагать, что $U(z \rightarrow -\infty) = 0$, поэтому в качестве точки z_0 можно выбрать произвольную точку, лежащую в области $U(z) \approx 0$. Как мы увидим позже, результаты расчета значений наблюдаемых величин от выбора z_0 не зависят.

Временной профиль импульса во всех точках $z > z_0$ определяется выражением

$$\psi(z, t)|_{z > z_0} = \int a(\omega) \frac{u_\omega(z)}{u_\omega(z_0)} \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (4.82)$$

где

$$a(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int \psi_0(z_0, t) \exp(i\omega t) dt = \frac{1}{2\pi} \int A(t) \exp[i(\omega - \omega_0)t] dt. \quad (4.83)$$

Например, в случае свободной частицы получаем

$$\psi(z, t)|_{z > z_0} = \int A(\omega) \exp [i\kappa(\omega)(z - z_0) - i\omega t] d\omega,$$

где

$$\kappa(\omega) = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c} = \frac{1}{c} \sqrt{\omega^2 - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2}} = \frac{1}{c} \sqrt{\omega^2 - k_C^2 c^2},$$

здесь $\lambda_C = 2\pi/k_C$ — комptonовская длина волны и

$$k_C = m_0 c / \hbar.$$

Наиболее реалистичной и удобной в практических приложениях является гауссова форма падающего импульса:

$$A(t) = A_0 \exp \left[-\frac{(t - t_0)^2}{2\tau_0^2} - i\frac{\alpha(t - t_0)^2}{2} \right], \quad (4.84)$$

которая позволяет ввести характерную длительность импульса τ_0 и параметр фазовой модуляции α , определяющий различие значений мгновенной частоты $\omega(t) = \omega_0 + \alpha(t - t_0)$ на фронте и в хвосте импульса. В этом случае

$$\begin{aligned} \psi(z, t) &= \frac{A_0 \tau_0}{\sqrt{2\pi(1 + i\alpha\tau_0^2)}} \exp(-i\omega_0 t) \times \\ &\times \int \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2(1 + i\alpha\tau_0^2)} + i\kappa(\omega)(z - z_0) - i(\omega - \omega_0)(t - t_0) \right] d\omega. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Если средняя энергия падающего волнового пакета (т. е. энергия частицы в точке $z = z_0$) существенно превышает неопределенность, связанную с конечной длительностью импульса τ_0 , то выполняется условие

$$\omega_0 \gg \omega - \omega_0 \approx \frac{1}{\tau_0}.$$

В этом случае мы можем разложить $\kappa(\omega)$ вблизи точки $\omega = \omega_0$ в степенной ряд:

$$\kappa(\omega) = \kappa(\omega_0) + \frac{\partial \kappa}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_0} (\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial \omega^2} \Big|_{\omega=\omega_0} (\omega - \omega_0)^2 + \dots \quad (4.86)$$

Подставляя разложение (4.86) в (4.85), получаем

$$\begin{aligned} \psi(z, t) &= \frac{A_0 \exp [i\kappa_0(z - z_0) - i\omega_0 t]}{\sqrt{1 - i\kappa_0'' \tau_0^{-2}(z - z_0)(1 + i\alpha\tau_0^2)}} \times \\ &\times \exp \left[-\frac{(t - \kappa_0' z)^2 (1 + i\alpha\tau_0^2)}{2\tau_0^2 [1 - i\kappa_0'' \tau_0^{-2}(z - z_0)(1 + i\alpha\tau_0^2)]} \right], \end{aligned} \quad (4.87)$$

где

$$\kappa_0 = \kappa(\omega_0), \quad \kappa'_0 = \left. \frac{\partial \kappa}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0}, \quad \kappa''_0 = \left. \frac{\partial^2 \kappa}{\partial \omega^2} \right|_{\omega=\omega_0} \quad (4.88)$$

и мы положили

$$\kappa'_0 z_0 - t_0 = 0.$$

Несложно видеть, что решение (4.87) представляет собой волновой пакет, фазовая скорость распространения которого определяется пространственно-временной зависимостью первой экспоненты в (4.87), а групповая скорость — второй. Выделяя энергию покоя частицы, для фазовой скорости получаем

$$v_p = \frac{\omega_0 - ck_C}{\kappa_0} = c \sqrt{\frac{\omega_0 - ck_C}{\omega_0 + ck_C}}. \quad (4.89)$$

Групповая скорость распространения волнового пакета определяется выражением

$$v_g = \frac{1}{\kappa'_0} = \left(\left. \frac{\partial \kappa}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0} \right)^{-1} = \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{E=E_0} = c \frac{pc}{\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}}. \quad (4.90)$$

Как видно, величины фазовой и групповой скоростей свободной частицы всегда меньше скорости света и стремятся к скорости света в ультрарелятивистском пределе: $E \gg m_0 c^2$.

Модуль квадрата волновой функции имеет вид

$$|\psi(z, t)|^2 = \frac{|A_0|^2}{\sqrt{(1 + \alpha \kappa''_0 (z - z_0))^2 + (\kappa''_0 \tau_0^{-2})^2 (z - z_0)^2}} \times \\ \times \exp \left[-\frac{(t - \kappa'_0 z)^2}{\tau_0^2 \left[(1 + \alpha \kappa''_0 (z - z_0))^2 + (\kappa''_0 \tau_0^{-2})^2 (z - z_0)^2 \right]} \right]. \quad (4.91)$$

Таким образом, падающий волновой пакет расплывается по мере его распространения:

$$\tau(z) = \tau_0 \sqrt{(1 + \alpha \kappa''_0 (z - z_0))^2 + (\kappa''_0 \tau_0^{-2})^2 (z - z_0)^2}. \quad (4.92)$$

Расстояние, на котором длительность волнового пакета, не обладающего фазовой модуляцией ($\alpha = 0$), увеличивается в $\sqrt{2}$ раз, называется дифракционной длиной и определяется выражением

$$l_d = \frac{\tau_0^2}{\kappa''_0}. \quad (4.93)$$

Фазово-модулированный волновой пакет также расплывается, если $\alpha > 0$. Однако если $\alpha < 0$, то сначала длительность волнового пакета уменьшается до значения τ_{\min} , а затем импульс начинает расплы-

ваться. Минимальное значение длительности импульса достигается на длине компрессии

$$l_c = \frac{\tau_0^2}{\kappa_0''} \frac{|\alpha| \tau_0^2}{(1 + \alpha^2 \tau_0^4)} \quad (4.94)$$

и имеет величину

$$\tau_{\min} = \frac{\tau_0}{\sqrt{1 + \alpha^2 \tau_0^4}}. \quad (4.95)$$

Длина дифракционного расплывания фазово-модулированного импульса с положительным $\alpha > 0$ определяется выражением

$$l_d^{(1)} = \frac{\tau_0^2}{\kappa_0''} \frac{\sqrt{1 + 2\alpha^2 \tau_0^4} - \alpha \tau_0^2}{1 + \alpha^2 \tau_0^4}, \quad (4.96)$$

при $\alpha < 0$ получаем

$$l_d^{(2)} = \frac{\tau_0^2}{\kappa_0''} \frac{\sqrt{1 + 2\alpha^2 \tau_0^4} + |\alpha| \tau_0^2}{1 + \alpha^2 \tau_0^4}. \quad (4.97)$$

При $\alpha = 0$ формулы (4.96) и (4.97) совпадают с (4.93).

Поскольку согласно (4.90) групповая скорость определяется производной $\partial E / \partial p$, мы видим, что групповые скорости положительной частицы в состоянии, задаваемом точкой 1, и отрицательной частицы в состоянии, задаваемом точкой 2, положительны, а групповая скорость положительной частицы в состоянии 3 и отрицательной частицы в состоянии 4 отрицательны.

4.3.3. Зеркальные частицы и темная материя. В разделе 4.1.2, обсуждая общее решение уравнения (4.3), мы представили его в виде суммы двух слагаемых (4.17), различающихся своими временными экспонентами. Такое разделение подчеркивает тот факт, что уравнение (4.3) является уравнением второго порядка по временной производной, поэтому общее решение уравнения зависит от двух линейно независимых временных функций, которые при решении стационарных задач имеют экспоненциальный вид. Однако уравнение (4.3) является уравнением второго порядка и по пространственным производным, поэтому, например, в одномерном случае при фиксированной энергии частицы мы имеем также и два линейно независимых пространственных решения. При движении частицы в трехмерном сферически симметричном поле волновая функция частицы представляется в виде разложения по шаровым функциям:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

а для радиальной волновой функции $R(r)$ мы получаем дифференциальное уравнение второго порядка, которое также имеет два линейно независимых решения.¹⁾

Решения, соответствующие двум линейно независимым временным функциям, мы связали с состояниями «положительных» и «отрицательных» частиц. Приводит ли учет четырех линейно независимых решений, например (4.74а, б), к появлению новых состояний материального поля, т.е. является ли обоснованным введение терминов «положительная» и «отрицательная» частица для характеристики состояний скалярного материального поля? Проиллюстрируем ответ на этот вопрос на примере одномерных задач рассеяния.

Пусть частица взаимодействует с внешним стационарным скалярным полем следующего вида:

$$\varphi(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ \varphi_0, & z \geq 0. \end{cases}$$

Уравнение (4.3) для волновой функции частицы $\psi^{(+)}(z)$ и зарядово-сопряженной частицы $\psi^{(-)}(z)$ имеет в этом случае вид

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(E - U^{(\pm)}(z))^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \right] \psi^{(\pm)}(z) = 0, \quad (4.98)$$

где $U^{(\pm)}(z) = \pm q_0 \varphi(z)$. Положительно частотные решения стационарного уравнения имеют хорошо известный вид

$$u^{(\pm)}(z) = \begin{cases} \exp(i\kappa z) + r_1^{(\pm)} \exp(-i\kappa z), & z < 0, \\ t_1^{(\pm)} \exp(ik^{(\pm)}z), & z \geq 0, \end{cases} \quad (4.99)$$

где

$$\kappa = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}, \quad k^{(\pm)} = \frac{\sqrt{(E \mp U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}, \quad U_0 = q_0 \varphi_0.$$

¹⁾ Отметим здесь, что в нерелятивистском случае при решении краевых задач для радиальной волновой функции, отвечающей дискретному спектру состояний, из двух линейно независимых решений оставляют лишь одно, удовлетворяющее условиям конечности волновой функции одновременно в нуле и на бесконечности [41]. В релятивистском случае из двух линейно независимых решений, отвечающих дискретному спектру, также оставляют одно. Однако, как известно [42, 43], в релятивистском случае это решение удовлетворяет лишь условию конечности волновой функции на бесконечности, поскольку волновые функции состояний с $l = 0$ являются расходящимися в нуле. В обоих случаях волновые функции сплошного спектра выбираются из соображений равенства нулю интегрального потока на бесконечности. Однако в задачах рассеяния учитываются оба решения, одно из которых соответствует расходящимся, а другое сходящимся сферическим волнам.

Амплитудные коэффициенты отражения $r_1^{(\pm)}$ и прохождения $t_1^{(\pm)}$ определяются из условий непрерывности волновой функции и ее производной в точке $z = 0$ и имеют вид

$$r_1^{(\pm)} = \frac{\kappa - k^{(\pm)}}{\kappa + k^{(\pm)}}, \quad t_1^{(\pm)} = \frac{2\kappa}{\kappa + k^{(\pm)}}.$$

Учитывая результаты рассмотрения, проведенного в разделе 4.1.3, общее решение уравнения для частицы имеет, например, вид

$$\psi_1^{(+)}(z, t) = Au^{(+)}(z) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + Bu^{(-)*}(z) \exp\left(i\frac{E}{\hbar}t\right), \quad (4.100)$$

где A и B — постоянные коэффициенты.

Как видно из асимптотической формы решений (4.99), эти решения соответствуют краевой задаче, когда частица или зарядово-сопряженная частица в начальный момент времени находятся в полупространстве $z < 0$, например в точке $z = -\infty$. Спектры собственных значений частицы $E_p^{(+)}$ и зарядово-сопряженной частицы $E_p^{(-)}$ в этом случае совпадают и определяются условием

$$|E_p^{(\pm)}| \geq m_0c^2.$$

Второе линейно независимое решение уравнений (4.98) отвечает начальному состоянию частицы и зарядово-сопряженной частицы в полупространстве $z > 0$, например $z = \infty$. Положительно частотные решения этой задачи имеют вид

$$v^{(\pm)}(z) = \begin{cases} \exp(-ik^{(\pm)}z) + r_2^{(\pm)} \exp(ik^{(\pm)}z), & z \geq 0, \\ t_2^{(\pm)} \exp(-ikz), & z < 0, \end{cases}$$

где амплитудные коэффициенты отражения и прохождения определяются теперь выражениями

$$r_2^{(\pm)} = \frac{k^{(\pm)} - \kappa}{k^{(\pm)} + \kappa}, \quad t_2^{(\pm)} = \frac{2k^{(\pm)}}{k^{(\pm)} + \kappa}.$$

Общее решение для зарядово-сопряженной частицы принимает в этом случае вид

$$\psi_2^{(-)}(z, t) = Av^{(-)}(z) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) + Bv^{(+)*}(z) \exp\left(i\frac{E}{\hbar}t\right). \quad (4.101)$$

Сравнение двух полученных решений показывает, что между ними имеются принципиальные различия.

Во-первых, спектр собственных значений частицы определяется теперь выражением $|E_p^{(+)} - U_0| \geq m_0c^2$ и не совпадает со спектром собственных значений зарядово-сопряженной частицы, определяемым выражением $|E_p^{(-)} + U_0| \geq m_0c^2$.

Во-вторых, решения (4.100) и (4.101) не являются комплексно сопряженными друг другу. Комплексно сопряженными являются лишь решения $\psi_2^{(-)*} = \psi_2^{(+)}$, что вполне естественно, поскольку решения $\psi_1^{(\pm)}$ и $\psi_2^{(\pm)}$ являются линейно независимыми решениями двух различных краевых задач для двух различных уравнений (4.98).

В-третьих, состояния материального поля в полупространствах $z < 0$ и $z > 0$ не являются эквивалентными. Действительно, на рис. 4.2 показаны гиперплоскости состояний частицы $\Gamma_1^{(\pm)}$ и зарядово-сопряженной частицы $\Gamma_3^{(\pm)}$ в полупространстве $z < 0$ и гиперплоскости состояний частицы $\Gamma_2^{(\pm)}$ и зарядово-сопряженной частицы $\Gamma_4^{(\pm)}$ в полупространстве $z > 0$. Несложно видеть, что если наблюдатель находится в полупространстве $z < 0$, то он никогда не сможет зарегистрировать частиц, состояния которых определяются частью гиперповерхности $\Gamma_2^{(-)}$, лежащей выше пунктирной линии, несмотря на то что отрицательные частицы в полупространстве $z > 0$ могут занимать указанные состояния. С другой стороны, наблюдатель, находящийся в полупространстве $z > 0$, никогда не сможет зарегистрировать частиц, состояния которых определяются частью гиперповерхности $\Gamma_1^{(+)}$, лежащей ниже пунктирной линии. Аналогичные соотношения имеют место и для состояний зарядово-сопряженной частицы, как это проиллюстрировано на рис. 4.2б. Таким образом, для наблюдателей, производящих свои измерения в областях пространства, отделенных друг от друга скачком потенциала, существует состояние «темной» материи, которую они не могут зарегистрировать, не выходя за область скачка потенциала. Следует отметить, что состояния частиц, лежащих на гиперплоскости $\Gamma_1^{(+)}$ ниже пунктирной линии, и состояния отрицательных частиц, лежащих на гиперплоскости $\Gamma_2^{(-)}$ выше пунктирной линии, зеркально симметричны и связаны с двумя линейно независимыми пространственными решениями уравнения (4.98). Это дает основания говорить о состоянии зеркальных частиц. Как видно из рис. 4.2, симметрия волновых функций указанных состояний обнаруживается лишь при одновременном использовании операции комплексного сопряжения и пространственной инверсии. При этом операция пространственной инверсии указывает на то, что эти два состояния отвечают двум линейно независимым пространственным решениям, а операция комплексного сопряжения указывает на то, что эти два состояния относятся к различным зонам состояний. Пока мы ограничимся приведенным выше полунтуитивным определением состояния «зеркальных частиц». Более глубокие физические обоснования использования указанного термина для характеристики состояний скалярного материального поля, отвечающих указанной симметрии, будут приведены в следующей главе.

Следует отметить, что состояния материального поля в виде «положительных» и «отрицательных» частиц, или частиц и зеркальных частиц, могут существовать одновременно в рамках одночастичной

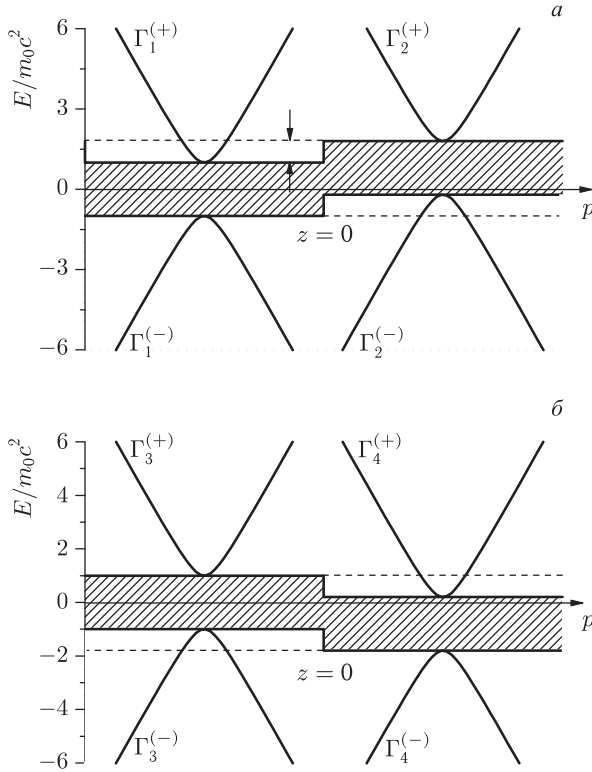


Рис. 4.2. Гиперплоскости состояний частицы $\Gamma_1^{(\pm)}$ и зарядово-сопряженной частицы $\Gamma_3^{(\pm)}$ в полупространстве $z < 0$ и гиперплоскости состояний частицы $\Gamma_2^{(\pm)}$ и зарядово-сопряженной частицы $\Gamma_4^{(\pm)}$ в полупространстве $z > 0$

теории только тогда, когда уравнение движения является уравнением второго порядка как по пространственной, так и по временной производным. В процессе развития квантовой механики были приняты многочисленные попытки избежать введения понятия отрицательной вероятности.¹⁾ Математическая основа соответствующих

¹⁾ Современный и детальный обзор развития квантовой механики можно найти в книге Вайнберга [20], в которой, правда, затрагиваются в основном, работы, касающиеся развития квантовой электродинамики, лежащей в основе современной теории квантованных полей. Ряд дополнительных ссылок, касающихся непосредственно развития представлений квантовой механики и квантовой теории поля, можно найти, например, в книгах Боба [44], Давыдова [45] и других учебных пособиях. Историю развития представлений квантовой механики можно проследить по работам Дирака (см. собрание научных трудов П.А.М. Дирака [46]).

исследований состоит в том, что оператор волнового уравнения КГФ $D^{(2)} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}$ с помощью тех или иных преобразований можно факторизовать, т. е. представить в виде произведения двух операторов, например, $D^{(2)} = D_+^{(1)} D_-^{(1)}$, где $D_{\pm}^{(1)} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \pm \boldsymbol{\alpha} \nabla \pm \frac{im_0 c}{\hbar} \beta$, а $\boldsymbol{\alpha}$ и β — матрицы Дирака. Такие преобразования, действительно, приводят к тому, что временная компонента 4-вектора плотности тока становится положительно определенной величиной. Однако при этом четыре линейно независимых решения (4.74а, б) (или, точнее, их аналоги) становятся двумя парами линейно независимых решений двух различных уравнений: $D_+^{(1)} \psi_+ = 0$ и $D_-^{(1)} \psi_- = 0$. Следовательно, анализ взаимодействия частиц, состояния которых описываются собственными волновыми функциями указанных двух различных уравнений, строго говоря, должен проводиться в рамках двухчастичной теории. Принципиальное физическое следствие состоит в том, что в рамках таких теорий процессы переноса энергии материального поля из области пространства, где $\varphi(z) = 0$, в область пространства, где $\varphi(z) = \varphi_0$, и обратные им процессы переноса в общем случае неэквивалентны, поскольку эти два процесса описываются решениями двух различных математических уравнений. В этом и состоит одно из основополагающих различий уравнений квантовой механики, основанных на линейных или квадратичных по оператору временной производной.

4.4. *CPT*-преобразования уравнений для частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем

Анализ решений уравнения (4.3), основанный пока лишь на решениях задачи о свободном движении частицы, уже показал качественное отличие топологии пространства состояний частицы, определяемой математическими свойствами решений указанного уравнения, от топологии пространства состояний частицы, описываемой каким-либо уравнением, включающим лишь первую временную производную. Естественно, что это отличие должно найти свое отражение и в симметричных свойствах уравнений по отношению к пространственно-временным преобразованиям.

Традиционно обсуждение операций преобразования пространственной инверсии, обращения времени и зарядового сопряжения непосредственно примыкает к обсуждению собственной ортохронной подгруппы преобразований Лоренца, которое мы провели в гл. 3, поскольку вместе они составляют полную группу преобразований Лоренца. Однако мы намеренно отказались от этого принципа изложения по ряду причин. Во-первых, свойства *CPT*-симметрии уравнений для свободной частицы кардинально отличаются от свойств *CPT*-симметрии для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем. Во-вторых,

обсуждение этих преобразований без предварительного анализа специфики классификации состояний частиц имело бы более абстрактно математический вид. В-третьих, анализ этих преобразований в настоящем разделе дает нам возможность, не повторяясь, продолжить обсуждение специфики состояний частиц, подчиняющихся уравнению (4.3).

Уравнение свободной релятивистской частицы

$$\frac{1}{2m_0} \left[\hbar^2 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \right) + m_0^2 c^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (4.102)$$

инвариантно относительно замен $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, $t \rightarrow -t$ и $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^*(\mathbf{r}, t)$, поэтому если функция $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения свободной частицы, то решениями являются и функции

$$\begin{aligned} \psi_0(\mathbf{r}, t), \quad \psi_0(-\mathbf{r}, t), \quad \psi_0(\mathbf{r}, -t), \quad \psi_0(-\mathbf{r}, -t), \\ \psi_0^*(\mathbf{r}, t), \quad \psi_0^*(-\mathbf{r}, t), \quad \psi_0^*(\mathbf{r}, -t), \quad \psi_0^*(-\mathbf{r}, -t). \end{aligned} \quad (4.103)$$

Таким образом, уравнение (4.102) является *CPT*-инвариантным, т.е. инвариантным относительно преобразований пространственной инверсии (*P*), обращения времени (*T*) и зарядового сопряжения (*C*).

Уже одно перечисление (4.103) преобразованных волновых функций, одновременно являющихся решениями уравнения (4.102), показывает, что количество преобразований симметрии уравнений, включающих вторую производную по времени, превышает количество преобразований симметрии любых уравнений, включающих лишь первую временную производную.

Вместе с тем несложно видеть, что уравнение движения частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \times \\ \times \psi(\mathbf{r}, t) = 0, \end{aligned} \quad (4.104)$$

в общем случае свойством *CPT*-инвариантности не обладает.

Поскольку реальные свойства частиц проявляются лишь в их взаимодействиях с внешними полями, то свойства симметрии уравнения (4.104) по отношению к указанным преобразованиям представляют гораздо более значительный интерес, чем свойства симметрии уравнения (4.102). Естественно, что симметричные свойства взаимодействующих полей зависят от симметричных свойств каждого из них. Здесь, однако, мы будем полагать, что внешнее электромагнитное поле является заданным, и будем анализировать, как симметрия заданного внешнего электромагнитного поля влияет на симметричные свойства волновой функции частиц, подчиняющихся уравнению (4.104).

4.4.1. Пространственная инверсия, обращение времени и зарядовое сопряжение. При преобразованиях зарядового сопряжения, пространственной инверсии и обращения времени уравнение (4.104) принимает вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p}' - \frac{q'}{c} \mathbf{A}'(\mathbf{r}', t') \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - q' \varphi'(\mathbf{r}', t') \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi'(\mathbf{r}', t') = 0. \quad (4.105)$$

Если дифференциальный оператор уравнения (4.105) с помощью указанных выше преобразований приводится к виду дифференциального оператора уравнения (4.104), то волновая функция $\psi'(\mathbf{r}', t')$ является одновременно и решением уравнения (4.104). Анализ симметричных свойств уравнения (4.104) состоит в определении условий, при которых такие преобразования возможны.

Выше мы отмечали, что волновая функция частицы с ненулевым зарядом является комплексной, поэтому, например, операции $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi(-\mathbf{r}, t)$ или $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^*(\mathbf{r}, -t)$, не меняющие частотность решения, отражают симметрию состояний материального поля, относящихся к одной и той же зоне состояний. С другой стороны, преобразования $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi(\mathbf{r}, -t)$ и $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^*(\mathbf{r}, t)$, меняющие частотность решения, отражают наличие симметрии в состояниях материального поля, относящихся к различным зонам состояний. Учитывая эти соображения, несложно догадаться, что число преобразований симметрии волновых уравнений со второй производной по времени удваивается по сравнению с числом преобразований симметрии уравнений, линейных по оператору временной производной. В этом состоит специфика CPT-преобразований релятивистского уравнения (4.104).

Определим операцию пространственной инверсии как $P_1 \psi(\mathbf{r}, t) = \psi(-\mathbf{r}, t)$, а операцию обращения времени — как $T_1 \psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, -t)$. Несложно видеть, что оператор уравнения (4.105) возвращается к исходному виду (4.104), если выполняются следующие условия:

$$P_1: \quad \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(-\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t), \quad (4.106)$$

$$T_1: \quad \mathbf{A}'(\mathbf{r}, -t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(\mathbf{r}, -t) = -\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (4.107)$$

В обоих случаях векторы напряженности электрического и магнитного полей преобразуются одинаково:

$$P_1: \quad \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t),$$

$$T_1: \quad \mathbf{E}'(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(\mathbf{r}, -t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t).$$

Полученные условия имеют наглядную интерпретацию, если обратиться к рис. 4.1. Преобразование $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi(-\mathbf{r}, t)$ переводит начальное состояние частицы из точки 1 в точку 3. В случае движения свободной

частицы изменение начального импульса частицы на противоположный не приводит к изменению характера движения частицы. В случае же частицы, движущейся во внешнем поле, характер движения не меняется, если одновременно с изменением начального импульса изменить на противоположное направление вектора напряженности электрического поля и оставить неизменным направление магнитного поля.

В случае движения частицы в одномерном потенциальном поле $\varphi(z)$ операция пространственной инверсии устанавливает связь между волновыми функциями, являющимися решениями двух задач рассеяния частиц потенциальным барьером $q_0\varphi(z)$, в первом случае частица налетает на барьер справа, а во втором — слева. Действительно, частицы, находящиеся в состояниях $u^{(1)}(z, t)$ и $u^{(3)}(z, t)$, движутся навстречу друг другу. Такая симметрия имеет место лишь в том случае, когда потенциальный барьер является пространственно симметричным: $U(z) = U(-z)$.

При преобразовании $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi(\mathbf{r}, -t)$ начальное состояние переходит из точки 1 в точку 4, относящуюся к отрицательно частотной зоне состояний. Как видно из формул (4.74), частица, находящаяся в состоянии 4, движется в направлении, противоположном направлению движения частицы в состоянии 1. Симметрия между волновыми функциями частицы и зеркальной частицы возможна лишь в случае, когда потенциальное поле является антисимметричным: $\varphi(z) = -\varphi(-z)$. Впрочем, необходимость выполнения указанных условий наглядно видна из рис. 4.2. Действительно, симметрия между волновой функцией частицы, находящейся в начальный момент в состоянии $u^{(1)}(z, t)$, и волновой функцией зеркальной частицы, находящейся в начальный момент в состоянии $u^{(4)}(z, t)$, может возникнуть лишь тогда, когда мы опустим пространственный профиль запрещенной зоны на величину $U_0/2$ во всем пространстве. Следует отметить, что указанное преобразование симметрии позволяет установить связь различных физических процессов, а не симметрию в движении какой-то выделенной частицы, поскольку, например, начальное состояние с волновой функцией $u^{(1)}(z, t)$ соответствует состоянию «частицы», а состояние с волновой функцией $u^{(4)}(z, t)$ — состоянию «зеркальной частицы». Вместе с тем обе они являются компонентами единого материального поля, волновая функция которого подчиняется уравнению (4.3).

Определим теперь операции пространственной инверсии и обращения времени следующими соотношениями:

$$P_2\psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(-\mathbf{r}, t), \quad T_2\psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, -t).$$

В этом случае оператор уравнения (4.105) принимает исходную форму при выполнении условий

$$P_2: \quad \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(-\mathbf{r}, t) = -\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (4.108)$$

$$T_2: \quad \mathbf{A}'(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(\mathbf{r}, -t) = \varphi(\mathbf{r}, t). \quad (4.109)$$

Векторы напряженности электрического и магнитного поля преобразуются в этом случае следующим образом:

$$\begin{aligned} P_2: \quad \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), & \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \\ T_2: \quad \mathbf{E}'(\mathbf{r}, -t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), & \mathbf{B}'(\mathbf{r}, -t) &= -\mathbf{B}(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Преобразование P_2 переводит состояние частицы из точки 1 в точку 4. Так же как и операция симметрии T_1 , преобразование P_2 устанавливает симметрию волновых функций в двух различных процессах рассеяния. В первом случае частица находится в начальный момент в состоянии 1 и рассеивается пространственно симметричной потенциальной ступенькой $\varphi_1(z) = \varphi_1(-z)$, а во втором случае частица находится в начальный момент времени в состоянии 4 и взаимодействует с той же самой потенциальной ступенькой, имеющей, однако, противоположный знак: $\varphi_2(z) = -\varphi_1(z)$.

Преобразование T_2 не меняет частотности решения и описывает симметрию прямого движения частицы в магнитном поле и обратного движения в инвертированном магнитном поле и неизменном электрическом поле.

Последовательное применение операций $P_i T_i$ меняет частотность решения, а следовательно, связывает состояния, относящиеся к различным зонам состояний. Действительно, используя (4.106)–(4.109), получаем

$$P_i T_i: \quad \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(-\mathbf{r}, -t) = -\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (4.110)$$

и уравнение (4.105) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + q_0 \varphi(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \times \\ \times \psi(-\mathbf{r}, -t) = 0. \quad (4.111) \end{aligned}$$

С другой стороны, последовательное применение операций $P_1 T_2$ или $P_2 T_1$ не меняет частотности решения и поэтому оставляет частицы в исходном состоянии. Используя (4.106)–(4.109), для преобразования потенциалов поля получаем

$$P_1 T_2: \quad \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, -t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(-\mathbf{r}, -t) = \varphi(\mathbf{r}, t), \quad (4.112)$$

и уравнение (4.105) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(-\mathbf{r}, -t) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi(-\mathbf{r}, -t) \right)^2 + \right. \\ \left. + m_0^2 c^2 \right] \psi^*(-\mathbf{r}, -t) = 0. \quad (4.113) \end{aligned}$$

Таким образом, преобразования $P_i T_j$ позволяют определить зависимость симметричных свойств волновых функций частицы, взаимодействующей с внешним нестационарным электромагнитным полем,

от четности 4-потенциала электромагнитного поля: $A_\mu(-x) = \pm A_\mu(x)$. Как видно, уравнение (4.111) совпадает с уравнением для зарядово-сопряженной частицы, а уравнение (4.113) — с уравнением для частицы.

Операция зарядового сопряжения определяется преобразованием

$$\psi_C(\mathbf{r}, t) = C\psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (4.114)$$

и связывает отрицательно частотные решения уравнения (4.104) с положительно частотными решениями уравнения (4.57). Потенциалы электромагнитного поля остаются при этом неизменными.

4.4.2. Частица и зарядово-сопряженная частица. Выше мы уже задавались вопросом, являются ли уравнения для частицы (4.3) и для зарядово-сопряженной частицы (4.57) уравнениями различных материальных полей, или же благодаря наличию связи (4.58) они являются уравнениями одного и того же материального поля. Ответ на этот вопрос зависит от того, совпадают ли тождественно состояния, отвечающие отрицательно частотным решениям уравнения для частицы и положительно частотным решениям уравнения для зарядово-сопряженной частицы, между которыми существует связь, обсуждавшаяся в разделе 4.1.4.

Как видно из результатов предыдущего обсуждения, операции P_i и T_i симметрии устанавливают связь между различными решениями одного и того же уравнения. В зависимости от ответа на поставленный выше вопрос операция зарядового сопряжения будет устанавливать симметрию между решениями волновых уравнений для различных материальных полей или одного и того же материального поля.

Сравнение преобразований пространственной инверсии и обращения времени с преобразованием зарядового сопряжения удобно провести в спинорном представлении. Выше мы уже говорили о том, что волновая функция заряженной скалярной частицы должна быть заведомо комплексной. Комплексная волновая функция эквивалентна двум действительным полям, т. е. является двухкомпонентной. Двухкомпонентное волновое поле можно записать в виде спинора, например:

$$\Psi_p(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \text{Re}(\psi(\mathbf{r}, t)) \\ \text{Im}(\psi(\mathbf{r}, t)) \end{pmatrix}.$$

Уравнения для действительной и мнимой частей волновой функции представляют собой связанную систему уравнений второго порядка. Вместо этой системы уравнений удобнее рассмотреть систему уравнений для волновой функции и комплексно сопряженной волновой функции. В этом случае компонентами спинора будут ψ и ψ^* :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, t) \\ \psi^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (4.115)$$

Учитывая, что уравнение для комплексно сопряженной волновой функции совпадает с уравнением для зарядово-сопряженной частицы, мы можем положить

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, t) \\ \psi_C(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (4.116)$$

Как мы показали в гл. 2, генераторами преобразования формы спинорной волновой функции являются (2×2) -матрицы, в качестве которых можно выбрать следующие:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.117)$$

Уравнение для частицы (4.3) и зарядово-сопряженной частицы (4.57) могут быть записаны в виде

$$(L_1 + iL_2)\psi = 0, \quad (L_1 - iL_2)\psi_C = 0, \quad (4.118)$$

где

$$L_1 = \frac{1}{2m_0} \left(p_\mu p_\mu + \frac{q_0^2}{c^2} A_\mu A_\mu + m_0^2 c^2 \right), \quad L_2 = \frac{q_0 \hbar}{m_0 c} A_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu}. \quad (4.119)$$

Следовательно, два скалярных уравнения (4.118) можно записать в виде одного спинорного уравнения

$$(L_1 + iL_2\tau_3)\Psi = 0. \quad (4.120)$$

С учетом того что $\tau_3^2 = I$, из (4.118)–(4.119) следует, что оператор

$$\hat{q} = q_0\tau_3 \quad (4.121)$$

является оператором заряда. Следует помнить, однако, что каждое из уравнений (4.3) и (4.57) содержит положительно и отрицательно частотные решения, которым отвечает противоположный знак плотности заряда, поэтому оператор (4.121) определяет лишь знак заряда $\pm |q_0|$, входящий в соответствующие уравнения. Для положительно частотных решений указанных уравнений,

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} A\psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) \\ B\psi_C^{(+)}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (4.122)$$

действие оператора (4.121) будет определять знак частицы в указанных состояниях. Однако поскольку уравнение (4.120) является уравнением второго порядка по временной производной, то наряду с решением (4.122) существует второе линейно независимое решение

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} C\psi^{(-)}(\mathbf{r}, t) \\ D\psi_C^{(-)}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C\psi_C^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \\ D\psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (4.123)$$

Поскольку уравнения для волновых функций ψ и ψ_C в принципе не обязаны быть связанными друг с другом, мы ввели в выражения (4.122) и (4.123) постоянные коэффициенты A , B , C , D , с тем

чтобы подчеркнуть, что две компоненты спинора (4.116) являются в общем случае общими решениями двух различных уравнений. Таким образом, общее решение уравнения (4.120) имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_1(\mathbf{r}, t) + \Psi_2(\mathbf{r}, t). \quad (4.124)$$

Введем операторы

$$\tau_{\pm} = \frac{1}{2}(I \pm \tau_3). \quad (4.125)$$

Поскольку операторы (4.125) коммутируют с оператором заряда (4.121), то их собственные волновые функции отвечают состояниям с определенным знаком заряда. Операторы τ_{\pm} имеют вид

$$\tau_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, решение, отвечающее заряду $q = q_0$, имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \tau_+ \Psi(\mathbf{r}, t) = A\psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) + C\psi^{(-)}(\mathbf{r}, t), \quad (4.126)$$

а решение, отвечающее заряду $q = -q_0$,

$$\psi_C(\mathbf{r}, t) = \tau_- \Psi(\mathbf{r}, t) = B\psi_C^{(+)}(\mathbf{r}, t) + D\psi_C^{(-)}(\mathbf{r}, t). \quad (4.127)$$

Несмотря на указанную привязку решений (4.126) и (4.127), напомним снова, что положительно частотные части этих решений отвечают зарядам q_0 и $-q_0$, а отрицательно частотные части отвечают состояниям, имеющим противоположный знак заряда.

Мы уже говорили выше, что, в принципе, волновые функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ и $\psi_C(\mathbf{r}, t)$ являются решениями двух различных уравнений и поэтому описывают динамику двух различных физических объектов, свойства которых совпадают по отношению к гравитационному взаимодействию и отличаются по отношению к электромагнитному взаимодействию. Следовательно, взаимодействие этих двух объектов должно описываться на основе уравнений для двухчастичной волновой функции $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$, зависящей от координат как одной частицы \mathbf{r}_1 , так и другой \mathbf{r}_2 . Например, расчет энергетических уровней атома позитрония требует привлечения двухчастичной волновой функции, зависящей от координат как электрона, так и позитрона.¹⁾ С другой стороны, решения $\psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ и $\psi^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ являются решениями одного и того же уравнения (4.104), а соотношение $\psi^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \psi_C^{(+)*}(\mathbf{r}, t)$ лишь отражает наличие симметрии между отрицательно частотным решением для частицы и положительно частотным решением уравнения для зарядово-сопряженной частицы. То обстоятельство, что компонентами

¹⁾ Электрон и позитрон являются частицами с полужелым спином. Однако по историческим причинам они являются единственными примерами частицы и зарядово-сопряженной частицы, имеющих различные названия. Поэтому мы пользуемся этим примером исключительно в иллюстративных целях.

спинора (4.116) являются функции ψ и ψ_C , не означает, что мы ввели новое материальное поле, компонентами которого являются одновременно частицы и зарядово-сопряженные частицы. Такое поле должно описываться биспинорной волновой функцией, у которой каждая из компонент, ψ и ψ_C , сама является спинором. Однако преобразования формы волновых функций скалярного комплексного и биспинорного полей при ортогональных преобразованиях координат различаются, поэтому уравнение для биспинорной волновой функции будет отличаться от уравнения (4.120). По этой же причине уравнение (4.120) отличается от уравнения для частиц материального поля, описываемого спинорными волновыми функциями

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix},$$

поскольку компоненты $\psi_{1,2}(\mathbf{r}, t)$ являются в этом случае независимыми, т. е., в отличие от компонент спинора (4.116), не связаны условием $\psi_1(\mathbf{r}, t) = \psi_2^*(\mathbf{r}, t)$.¹⁾

4.4.3. Проективные представления. Обратимся теперь к уравнениям (4.3) и (4.57), записанным в спинорном виде (4.120). Уравнение, комплексно сопряженное (4.120), имеет вид

$$(L_1 - i\tau_3 L_2) \Psi^* = 0, \quad (4.128)$$

где волновая функция Ψ^* принимает теперь вид

$$\Psi^* = \begin{pmatrix} A^* \psi^{(+)*} + C^* \psi_C^{(+)} \\ B^* \psi_C^{(+)*} + D^* \psi^{(+)} \end{pmatrix}.$$

Учитывая, что уравнения (4.120) и (4.128) связаны так же, как и уравнения (4.3) и (4.57), спинорную волновую функцию уравнения (4.128) можно назвать зарядово-сопряженной спинорной волновой функцией:

$$\Psi_C = \Psi^*. \quad (4.129)$$

¹⁾ Здесь следует отметить, что представления группы преобразования формы спинорной волновой функции, как было показано в разделе 2.3.6, изоморфны лишь представлениям группы трехмерных вращений, поэтому релятивистская форма уравнений для спинорной волновой функции вряд ли возможна. Действительно, поскольку операторы, соответствующие наблюдаемым величинам, являются генераторами преобразований симметрии, то оператору углового момента \mathbf{I} в этом случае соответствует оператор спина \mathbf{s} . Однако для оператора \mathbf{k} , являющегося генератором преобразования пространственно-временных вращений, эквивалентного партнера, который являлся бы генератором группы пространственно-временных вращений по собственным степеням свободы движения частицы, не существует. Это свидетельствует о том, что добавление к уравнению КГФ слагаемого (2.91) приводит к уравнению, которое не обладает всеми симметриями, определяемыми преобразованиями Лоренца.

Действительно, компоненты спинорной волновой функции Ψ_C меняются местами по сравнению с компонентами спинора (4.116):

$$\tau_+ \Psi_C = C^* \psi_C^{(+)} + A^* \psi_C^{(-)} = \psi_C, \quad \tau_- \Psi_C = D^* \psi^{(+)} + B^* \psi^{(-)} = \psi.$$

Учитывая вид операторов $L_{1,2}$ и условия (4.106)–(4.109), получаем

$$P_1: \quad (L_1 + i\tau_3 L_2) \Psi(-\mathbf{r}, t) = 0, \quad (4.130a)$$

$$T_1: \quad (L_1 + i\tau_3 L_2) \Psi(\mathbf{r}, -t) = 0, \quad (4.130б)$$

$$P_2: \quad (L_1 + i\tau_3 L_2) \Psi^*(-\mathbf{r}, t) = 0, \quad (4.130в)$$

$$T_2: \quad (L_1 + i\tau_3 L_2) \Psi^*(\mathbf{r}, -t) = 0. \quad (4.130г)$$

Несложно видеть, что матрицы U , возвращающие уравнения (4.130а–г) к исходному виду, должны коммутировать с оператором τ_3 . Следовательно, их можно представить в виде

$$U = aI + b\tau_3.$$

Матрица U является унитарной, если выполняется условие

$$U^+ U = |a|^2 + |b|^2 + (a^* b + ab^*) \tau_3 = I.$$

Несложно видеть, что это условие выполняется, если $|a|^2 + |b|^2 = 1$ и коэффициент a является, например, действительным, а коэффициент b — чисто мнимым. Полагая $a = \cos \varphi$ и $b = i \sin \varphi$, окончательно получаем

$$\begin{aligned} U_P^{(1)} &= \exp(i\varphi_P^{(1)} \tau_3), & U_T^{(1)} &= \exp(i\varphi_T^{(1)} \tau_3), \\ U_P^{(2)} &= \exp(i\varphi_P^{(2)} \tau_3), & U_T^{(2)} &= \exp(i\varphi_T^{(2)} \tau_3), \end{aligned} \quad (4.131)$$

т.е. матрицы U являются матрицами вращения вокруг оси 3 пространства внутренних степеней свободы спинорной волновой функции. Следовательно, осуществляемые этими матрицами преобразования не меняют зарядового состояния частицы, т.е. не переводят состояния частицы в состояния зарядово-сопряженной частицы или наоборот.

В предыдущем разделе мы рассматривали преобразования $P_i T_j$ как последовательность двух преобразований. Тогда с учетом (4.110) и (4.112)

$$P_1 T_1: \quad (L_1(\mathbf{r}, t) + i\tau_3 L_2(\mathbf{r}, t)) \Psi(-\mathbf{r}, -t) = 0,$$

$$P_1 T_2: \quad (L_1(\mathbf{r}, t) + i\tau_3 L_2(\mathbf{r}, t)) \Psi^*(-\mathbf{r}, -t) = 0.$$

В этом случае матрицы преобразования снова имеют вид (4.131), т.е. могут быть записаны в виде произведения соответствующих матриц (4.131).

Поскольку одновременное преобразование координат и времени связано с задачами взаимодействия частицы с нестационарными внешними электромагнитными полями (например, 4-потенциал поля которых зависит от произведения $k_\mu x_\mu = \mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t$), то, по-видимому,

большой интерес представляют преобразования комбинированной пространственно-временной инверсии:

$$(PT)_1: A_\mu(-x) = -A_\mu(x), \quad (4.132)$$

$$(PT)_2: A_\mu(-x) = A_\mu(x). \quad (4.133)$$

При этих преобразованиях уравнение (4.120) принимает вид

$$(PT)_1: (L_1 + i\tau_3 L_2) \Psi(-x) = 0, \quad (4.134)$$

$$(PT)_2: (L_1 - i\tau_3 L_2) \Psi(-x) = 0. \quad (4.135)$$

Матрица преобразования уравнения (4.134) снова имеет вид (4.131). Однако, как видно, матрица преобразования уравнения (4.135) не коммутирует с оператором τ_3 , а следовательно, является суперпозицией операторов τ_1 и τ_2 . Запишем ее в виде

$$U_{PT}^{(2)} = a\tau_1 + b\tau_2.$$

Матрица U_{PT} является унитарной, если выполняется условие

$$U_{PT}^{(2)+} U_{PT}^{(2)} = |a|^2 + |b|^2 + (a^*b - ab^*) \tau_1 \tau_2 = I.$$

Несложно видеть, что это условие выполняется, когда a и b являются действительными числами. В этом случае матрица U_{PT} принимает вид

$$U_{PT}^{(2)} = \tau_1 \exp\left(i\varphi_{PT}^{(2)} \tau_3\right). \quad (4.136)$$

Матрица (4.136), наряду с вращением вокруг оси Z пространства внутренних степеней свободы, осуществляет также перестановку верхней и нижней волновых функции спинора. Следовательно, эта матрица меняет зарядовое состояние спинорной волновой функции. Действительно, такой же вид имеет и матрица зарядового сопряжения, которая преобразует уравнение для зарядово-сопряженной волновой функции (4.128) в уравнение (4.120):

$$U_C = \tau_1 \exp\left(i\varphi_C \tau_3\right). \quad (4.137)$$

Мы видим, что результат последовательного применения операций комбинированной пространственно-временной инверсии и зарядового сопряжения оказывается различным для полей, векторные потенциалы которых являются нечетной или четной функциями 4-координаты $x = (\mathbf{r}, ict)$:

$$U_C U_{PT}^{(1)} = \tau_1 \exp\left[i\left(\varphi_C + \varphi_{PT}^{(1)}\right) \tau_3\right],$$

$$U_C U_{PT}^{(2)} = \exp\left[i\left(\varphi_{PT}^{(2)} - \varphi_C\right) \tau_3\right].$$

В то время как преобразование $C(P T)_1$ переводит состояние частицы в состояние зарядово-сопряженной частицы, преобразование $C(P T)_2$ сводится к вращению вокруг оси Z внутренних степеней свободы частицы, т. е. не меняет ее зарядового состояния.

Ввиду унитарности матриц (4.131) и (4.136) они не изменяют величины нормы волновых функций. Однако они осуществляют преобразования «с точностью до фазы», поэтому представление, основанное на использовании указанных матриц, называется проективным. Например, матрицы (4.131) осуществляют следующее преобразование волновых функций: $\tau_{\pm}\Psi'(x') \rightarrow \tau_{\pm}\Psi(x) \exp(\pm i\varphi_{PT})$. В свою очередь матрицы (4.136) преобразуют волновые функции как $\tau_{\pm}\Psi'(x') \rightarrow \tau_{\pm}\Psi_C(x) \exp(\mp i\varphi_{PT})$. Однако если наложить на преобразования дополнительные требования, например, положить, что двукратное применение операции пространственной инверсии эквивалентно тождественному преобразованию, то $\varphi_P = 0$, π (поскольку вращение на углы, равные 0 и 2π , возвращают оси в исходное положение) и матрица U_P принимает вид $U_P = \pm I$, т.е. преобразование становится обычным. Аналогично, полагая $U_T^2 = \exp(i2\varphi_T\tau_3) = I$, получаем $U_T = \pm I$. Однако квадрат матриц U_C и $U_{PT}^{(2)}$ тождественно равен единице.

Такое различие свойств матриц преобразований можно объяснить следующим образом. Волновая функция свободной частицы, находящейся в однородном постоянном поле $\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0$, имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} \left[A_{\mathbf{p}}^{(+)} \exp\left(-i\frac{U_0 t}{\hbar} - i\frac{\Gamma_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) + \right. \\ \left. + A_{\mathbf{p}}^{(-)} \exp\left(-i\frac{U_0 t}{\hbar} + i\frac{\Gamma_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) \right].$$

Волновая функция зарядово-сопряженной частицы, находящейся в этом же поле, имеет вид

$$\psi_C(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} \left[B_{\mathbf{p}}^{(+)} \exp\left(i\frac{U_0 t}{\hbar} - i\frac{\Gamma_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) + \right. \\ \left. + B_{\mathbf{p}}^{(-)} \exp\left(i\frac{U_0 t}{\hbar} + i\frac{\Gamma_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) \right].$$

Несложно видеть, что в то время как симметрия между движением частицы и движением зарядово-сопряженной частицы имеет место всегда, поскольку

$$\psi_C(\mathbf{r}, t) = \psi(-\mathbf{r}, -t),$$

симметрия между положительно и отрицательно частотными решениями уравнения для частицы имеет место лишь в случае $U_0 = 0$, поскольку только в этом случае мы получаем

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \psi^{(-)}(-\mathbf{r}, -t).$$

Таким образом, проведенный анализ показывает, что преобразование спинорной волновой функции (4.115), удовлетворяющей уравнению (4.120), не являются релятивистски инвариантными, поэтому уравнения для частицы (4.3) и для зарядово-сопряженной частицы (4.57) являются волновыми уравнениями различных материальных полей.

Глава 5

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СКАЛЯРНОГО МАТЕРИАЛЬНОГО ПОЛЯ С ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИМ ПОЛЕМ (ЧАСТИЦЫ И ЗЕРКАЛЬНЫЕ ЧАСТИЦЫ)

Проведенный выше анализ уравнения (4.3) показал, что математические свойства решений этого уравнения существенно отличаются от свойств решений нерелятивистского уравнения Шредингера. Это с неизбежностью приводит к тому, что и физические свойства частиц, определяемые этими двумя уравнениями, несомненно, окажутся различными. Поскольку пространство состояний релятивистской частицы, подчиняющейся уравнению КГФ, вдвое больше пространства состояний нерелятивистской частицы, то очевидно, что лишь состояния частицы, относящиеся к положительно частотной зоне состояний, в нерелятивистском пределе могут привести нас к результатам, совпадающим с результатами нерелятивистских теорий. Наличие же отрицательно частотной зоны состояний у релятивистской частицы, описываемой волновым уравнением, содержащим вторую производную по времени, позволяет предсказать качественно новые явления.

Настоящая глава посвящена рассмотрению двух традиционных задач квантовой механики: 1) рассеяния частицы одномерным потенциальным барьером и 2) движения частицы в кулоновском поле. Как мы увидим, именно наличие двух зон состояний релятивистской частицы приводит к качественно новым результатам, которые традиционно находятся вне рамок теории электромагнитного взаимодействия и принципиально не могут быть получены в рамках нерелятивистских теорий.

Задача о рассеянии частицы одномерным потенциальным барьером позволяет дать простую и наглядную интерпретацию основ теории зеркальных частиц. Следует отметить, что именно отсутствие последовательной теории зеркальных частиц привело к появлению таких эмоционально окрашенных терминов, как «темная материя», «черные дыры» и т. п., которые мы также бегло обсудим здесь.

Дальнейшее развитие представлений о структуре зеркальных частиц дает задача о движении частицы в кулоновском поле. Сначала мы приведем решения, отвечающие положительно частотной зоне состояний, и покажем, что в нерелятивистском пределе рассматриваемый спектр связанных состояний материального поля совпадает с расчетами нерелятивистской теории. Однако наличие второй временной производной в релятивистских уравнениях приводит к появлению релятивистского слагаемого, пропорционального квадрату потенциа-

ла кулоновского поля: $U^2(r) = Z^2 e^4 / r^2$, или, в нормированном виде: $Z^2 \alpha^2 / r^2$, где Z — заряд ядра водородоподобного атома или иона, а α — постоянная тонкой структуры. При $Z\alpha \ll 1$ наличие этого слагаемого проявляется в появлении тонкой и сверхтонкой структуры спектров, а с ростом $Z\alpha$ релятивистский и нерелятивистский спектры связанных состояний начинают существенно различаться.

Релятивистское слагаемое $U^2(r)$ оказывает кардинальное влияние на спектр отрицательно частотной зоны состояний. При учете указанного слагаемого связанные состояния материального поля возникают и в отталкивающем кулоновском поле. Это означает, что отрицательно частотный спектр состояний частицы в кулоновском поле содержит связанные состояния. Мы покажем, что указанные состояния являются аналитическим продолжением состояний положительно частотной зоны на область отрицательных значений углового момента. Это обстоятельство позволяет связать указанные состояния со связанными состояниями зеркальных частиц. Волновые функции связанных состояний зеркальных частиц являются расходящимися в нуле, однако они являются нормируемыми, что обусловлено отмеченной выше связью этих волновых функций с волновыми функциями состояний положительно частотной зоны. Область пространственной локализации волновых функций зеркальных частиц при $Z\alpha \ll 1$ имеет порядок классического радиуса частицы, поэтому зеркальные частицы определяют состояние ядра атома, а не его атомной оболочки. Как видно, релятивистская структура спектра состояний частицы в кулоновском поле существенно меняет представления о строении атомоподобных систем.

5.1. Скалярные зеркальные частицы

В предыдущей главе на примере свободной частицы мы показали, что принципиальное отличие релятивистских уравнений от нерелятивистских состоит в том, что пространство состояний релятивистской частицы образует две поверхности в четырехмерном пространстве, которые отделены друг от друга запрещенной зоной $\Delta E = 2m_0 c^2$. Это обусловлено тем, что задание трех пространственных квантовых чисел не определяет полностью состояния материального поля, т. е. состояния релятивистской частицы. Действительно, уравнение КГФ является дифференциальным уравнением второго порядка по временной производной. Следовательно, наряду с положительно частотными решениями, для которых зависимость частоты от пространственных квантовых чисел \mathbf{p} имеет вид $\omega(\mathbf{p}) = g^{(+)}(\mathbf{p})$, всегда существуют отрицательно частотные решения, для которых $\omega(\mathbf{p}) = g^{(-)}(\mathbf{p})$. В случае свободной частицы эти соотношения имеют, например, вид:

$$\hbar\omega^{(\pm)}(\mathbf{p}) = U_0 \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}.$$

При движении частицы в стационарном внешнем поле пространственный профиль запрещенной зоны определяется профилем по-

тенциальной энергии: $U(\mathbf{r}) = q_0\varphi(\mathbf{r})$, а ширина запрещенной зоны по-прежнему определяется удвоенной массой покоя частицы. В нерелятивистском случае, когда величина скачка потенциальной энергии много меньше массы покоя частицы: $\Delta U \ll m_0c^2$, наличие второй зоны состояний не проявляется, поскольку равенство $\omega^{(+)}(\mathbf{p}) = \omega^{(-)}(\mathbf{p}')$ никогда выполняться не может. Поскольку положительно частотные решения мы, временно, связали с состояниями «положительных» частиц, а отрицательно частотные решения с состояниями «отрицательных» частиц, то из закона сохранения энергии следует, что при движении частицы в стационарном электромагнитном поле наличие или отсутствие решений, соответствующих «отрицательной» частице, не сказывается на поведении «положительной» частицы, и наоборот, если высота скачка потенциальной энергии много меньше массы покоя частицы, т. е. $\Delta U \ll m_0c^2$.

В релятивистском же случае неучет второй зоны состояний, т. е. отбрасывание второго линейно независимого решения $\omega^{(-)}(\mathbf{p})$, неизбежно приводит к принципиальным ошибкам в описании характера взаимодействия материальных частиц с электромагнитным полем. Действительно, как мы неоднократно отмечали выше, реалистичными состояниями частицы, отвечающими условию равенства нулю волновой функции частицы на бесконечно удаленной поверхности трехмерного объема, являются волновые пакеты, представляющие собой суперпозиции плоских волн. Скорость переноса энергии волновым пакетом определяется групповой скоростью частицы $\mathbf{v}_g = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$, а не фазовой, фигурирующей в теории плоских волн. Поэтому групповая скорость является наблюдаемой физической величиной.

Действительно, в релятивистском случае, когда величина скачка потенциальной энергии частицы превышает удвоенную массу покоя, равенство $\omega^{(+)}(\mathbf{p}) = \omega^{(-)}(\mathbf{p}')$ выполняется при энергии налетающей частицы, лежащей в пределах $m_0c^2 \leq E^{(+)} \leq U_0 - m_0c^2$. При учете лишь положительно частотных решений групповая скорость прошедшей частицы остается всегда неотрицательной, в то время как при учете обоих решений групповые скорости падающего $\partial E^{(+)}/\partial\mathbf{p}$ и прошедшего $\partial E^{(-)}/\partial\mathbf{p}$ волновых пакетов могут быть противоположно направлены, несмотря на то что фазовые скорости плоских волн, составляющих указанные волновые пакеты, имеют одинаковое направление как для падающей, так и для прошедшей частиц.

Таким образом, топология пространства состояний релятивистской частицы приводит к тому, что при определенных условиях состояние частицы может стать суперпозицией состояний, относящихся к различным зонам, т. е. суперпозицией состояний «положительных» и «отрицательных» частиц. Уже анализ одномерных задач рассеяния показывает, что пространственно-временная динамика распространения частиц в этом случае качественно отличается от традиционных представлений, а термин «отрицательные» частицы получает физическую интерпретацию в виде новых состояний материального поля — состояний зеркаль-

ных частиц. Несложно видеть, что учет лишь положительно частотной зоны состояний (и неучет отрицательно частотной зоны) не приводит к появлению зеркальных частиц даже в рамках релятивистских теорий.

В настоящем разделе мы определим условия, необходимые для возникновения зеркальных частиц, и рассмотрим специфику процессов, происходящих с их участием.

5.1.1. Отражение от потенциальной ступеньки. Одной из простейших задач взаимодействия частицы с внешними полями является задача о движении частицы в скачкообразном потенциале:

$$U(z) = q_0\varphi(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ U_0, & z \geq 0. \end{cases} \quad (5.1)$$

Сравним решения указанной задачи для нерелятивистского уравнения Шредингера и уравнения КГФ. Пространственные части волновых функций уравнения Шредингера

$$\psi_S(z, t) = u_1(z) \exp(-iEt/\hbar)$$

и уравнения КГФ

$$\psi_{KGF}(z, t) = u_2(z) \exp(-iEt/\hbar)$$

определяются решениями сходных краевых задач

$$\left[\Delta + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(z)) \right] u_1(z) = 0, \quad (5.2)$$

$$\left[\Delta + \frac{(E - U(z))^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \right] u_2(z) = 0. \quad (5.3)$$

Граничные условия для краевых задач (5.2) и (5.3) состоят в задании асимптотического вида решений при $z \rightarrow \pm\infty$ и имеют вид

$$u_i(z) = \begin{cases} \exp(ik_i z) + r_i \exp(-ik_i z), & z \rightarrow -\infty, \\ t_i \exp(ik_i z), & z \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (5.4)$$

где коэффициенты r_i и t_i имеют смысл амплитудных коэффициентов отражения и прохождения, а величина волновых векторов κ_i и k_i , согласно (5.2)–(5.3), определяется выражениями

$$\kappa_1(E) = \frac{\sqrt{2m_0 E}}{\hbar}, \quad k_1(E) = \frac{\sqrt{2m_0(E - U_0)}}{\hbar}, \quad (5.5)$$

$$\kappa_2(E) = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}, \quad k_2(E) = \frac{\sqrt{(E - U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}. \quad (5.6)$$

Отметим то очевидное обстоятельство, что в нерелятивистском пределе ($E - m_0 c^2 \ll m_0 c^2$ и $U_0 \ll m_0 c^2$) формулы (5.6) преобразуются в (5.5), поскольку в этом случае $E^2 - m_0^2 c^4 \approx 2m_0 c^2 (E - m_0 c^2)$.

Амплитудные коэффициенты отражения r и прохождения t определяются из условия непрерывности волновой функции и ее производной в точке $z = 0$:

$$\psi(z)|_{z=-0} = \psi(z)|_{z=+0}, \quad \psi'(z)|_{z=-0} = \psi'(z)|_{z=+0}.$$

Используя эти условия, получаем

$$r_i = \frac{\kappa_i - k_i}{\kappa_i + k_i}, \quad t_i = \frac{2\kappa_i}{\kappa_i + k_i}. \quad (5.7)$$

Как мы отмечали выше, закон сохранения заряда требует обращения в нуль суммарного потока через бесконечно удаленную поверхность ¹⁾:

$$\oint \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0.$$

Это условие позволяет отнормировать поток отраженных и прошедших частиц на единичный поток падающих частиц. В результате для энергетических коэффициентов отражения R и прохождения T получаем

$$R_i = |r_i|^2, \quad T_i = \frac{\text{Re}(k_i)}{\kappa_i} |t_i|^2. \quad (5.8)$$

Анализ формул (5.8) показывает, что в случае когда высота потенциальной ступеньки много меньше массы покоя частицы $U_0 \ll m_0 c^2$, коэффициенты отражения $R_{1,2}$ и прохождения $T_{1,2}$ практически полностью совпадают в широкой области энергий налетающей частицы. При высоте потенциальной ступеньки, лежащей в пределах $m_0 c^2 \leq U_0 \leq 2m_0 c^2$, также наблюдается достаточно хорошее количественное совпадение. Однако когда высота потенциальной ступеньки превышает удвоенную массу покоя частицы, $U_0 > 2m_0 c^2$, возникают качественные отличия в энергетических спектрах отражения, определяемых решением уравнения Шредингера (5.2) и КГФ (5.3).

В качестве иллюстрации на рис. 5.1 показаны энергетические коэффициенты отражения и прохождения для двух значений величины потенциальной ступеньки: $U_0 = m_0 c^2$ (кривые *a*, *б*), $U_0 = 3m_0 c^2$ (кривые *в*, *г*), где сплошной линией показаны коэффициенты отражения и прохождения для уравнения КГФ, а пунктирной линией — для нерелятивистского уравнения Шредингера. При высоте потенциального барьера, равной массе покоя частицы $U_0 = m_0 c^2$ (рис. 5.1, *a*, *б*), границы областей полного отражения кривых $R_1(\Delta E)$ и $R_2(\Delta E)$ полностью

¹⁾ Как мы отмечали в предыдущей главе, интегрирование в релятивистски инвариантном определении вероятности (4.12) можно вести по произвольным гиперплоскостям, а не только по гиперплоскости $t = \text{const}$. Именно в этом смысле следует понимать предельный переход $V \rightarrow \infty$, который мы используем, следуя традициям, принятым в рамках нерелятивистской квантовой механики. Следует отметить, что при использовании волновых пакетов указанную область пространства–времени можно полагать конечной (см. раздел 5.1.6).

совпадают, а небольшие количественные отличия в области энергий налетающей частицы $m_0c^2 \leq \Delta E \leq 2m_0c^2$ обусловлены тем, что в релятивистской области энергий дисперсионные зависимости (5.6) являются более точными, чем зависимости (5.5). С целью унификации графиков энергия как релятивистской, так и нерелятивистской частиц отсчитывается от массы покоя частицы: $\Delta E = E - m_0c^2$.

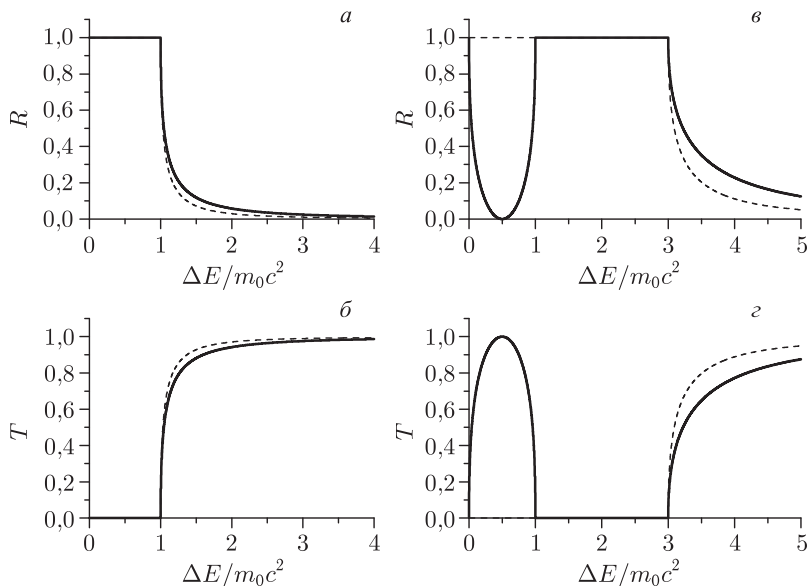


Рис. 5.1. Зависимость коэффициентов отражения R и прохождения T от энергии налетающей частицы: при высоте потенциальной ступеньки $U_0 = m_0c^2$ (а, б), $U_0 = 3m_0c^2$ (в, г)

При высоте потенциального барьера $U_0 = 3m_0c^2$ (рис. 5.1, в, г) возникают качественные отличия. Действительно, коэффициент отражения R_1 задачи (5.2) равен единице, а коэффициент прохождения T_1 равен нулю во всей области энергий налетающей частицы, меньшей высоты потенциальной ступеньки: $\Delta E = E - m_0c^2 \leq U_0$. Напротив, коэффициент отражения R_2 задачи (5.3) равен единице лишь в области $U_0 - m_0c^2 \leq E \leq U_0 + m_0c^2$, где коэффициент прохождения T_2 равен нулю. В областях $m_0c^2 < E < U_0 - m_0c^2$ и $E > U_0 + m_0c^2$ коэффициент отражения в этом случае меньше единицы, а коэффициент прохождения больше нуля.

5.1.2. Зеркальные частицы. Различия коэффициентов $R_1(\Delta E)$ и $R_2(\Delta E)$ на рис. 5.1, б в области энергий налетающей частицы, большей высоты потенциальной ступеньки, $\Delta E > U_0$, вполне объяснимы и обусловлены отличием релятивистских и нерелятивистских соотноше-

ний между энергией и импульсом частицы. Более необычным выглядит их различие в области энергий налетающей частицы, лежащей в пределах $0 \leq \Delta E \leq (U_0 - 2m_0c^2)$.

Интерпретация такого необычного поведения коэффициентов прохождения и отражения уравнения КГФ представлена на рис. 5.2. Действительно, когда энергия падающей частицы удовлетворяет условию $E > U_0 + m_0c^2$, частица находится выше потолка заштрихованной области как при $z < 0$, так и при $z > 0$. Заштрихованная область соответствует запрещенной зоне состояний (т. е. энергетической щели между областью положительно и отрицательно частотных решений). Следовательно, в указанном случае состояние частицы принадлежит положительно частотной зоне состояний как при $z > 0$, так и при $z < 0$. В этом случае $\rho(z) > 0$ при любом z . Если энергия падающей частицы находится в интервале $m_0c^2 < E < U_0 - m_0c^2$, то при $z < 0$ частица находится в состоянии, отвечающем положительно частотной зоне, а при $z > 0$ она находится в состоянии, отвечающем отрицательно частотной зоне. В этом случае $\rho(z) > 0$ при $z < 0$, в то время как $\rho(z) < 0$ при $z > 0$. Таким образом, качественное различие в поведении частиц, описываемых уравнениями Шредингера и КГФ, обусловлено тем, что пространство состояний релятивистской частицы содержит две зоны состояний, $E^{(\pm)}(\mathbf{p})$, отделенные конечным энергетическим интервалом $E^{(+)} - E^{(-)} = 2m_0c^2$, в то время как решение уравнения Шредингера подразумевает наличие лишь одной положительно частотной зоны состояний и поэтому даже качественно не описывает явлений, происходящих при движении частицы во внешнем электростатическом поле со скачком потенциальной энергии, превышающим удвоенную массу покоя частицы.

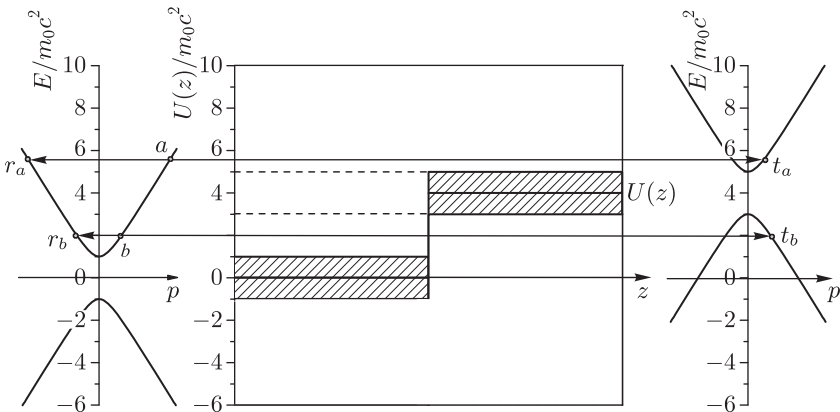


Рис. 5.2. Пространственный профиль запрещенной зоны состояний и вид сечения гиперплоскости состояний частицы в области до барьера $z < 0$ (слева) и после барьера $z > 0$ (справа)

Приведенная выше интерпретация необычного поведения энергетических спектров отражения в релятивистской области энергий основана на решении стационарной задачи рассеяния, в которой полагается, что состояние налетающей частицы является плоской волной. Как мы отмечали выше, более реалистичным является состояние налетающей частицы в виде волнового пакета. Пусть падающая волна задана при $z_0 = -L$ в виде волнового пакета (4.81), временной профиль которого определяется выражением (4.84). Естественно, мы полагаем, что расстояние L значительно превышает пространственный размер падающего волнового пакета $l_0 = c\tau_0$. Тогда, согласно формуле (4.82), пространственно-временные профили отраженной и прошедшей частиц определяются соответственно выражениями

$$\begin{aligned}\psi_r(z, t) &= \int a(\omega)r(\omega) \exp[-i\kappa(\omega)(z + z_0) - i\omega t] d\omega, \\ \psi_t(z, t) &= \int a(\omega)t(\omega) \exp[i(k(\omega)z - \kappa(\omega)z_0) - i\omega t] d\omega,\end{aligned}$$

где, как и ранее, $\omega = E/\hbar$. Ниже мы будем рассматривать лишь частицы, подчиняющиеся уравнению КГФ, поэтому далее

$$\kappa(\omega) = \frac{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - m_0^2c^4}}{\hbar c}, \quad k(\omega) = \frac{\sqrt{(\hbar\omega - U_0)^2 - m_0^2c^4}}{\hbar c}.$$

Пусть падающий волновой пакет не является фазово-модулированным, т. е. положим $\alpha = 0$ в формуле (4.84), тогда пространственно-временной профиль падающего волнового пакета в области $-L < z < 0$, согласно (4.85), определяется выражением

$$\begin{aligned}\psi_0(z, t) &= \frac{A_0\tau_0}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega_0 t) \times \\ &\times \int \exp\left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2} + i\kappa(\omega)(z + L) - i(\omega - \omega_0)t\right] d\omega,\end{aligned}$$

где $\omega_0 = E_0/\hbar$. Пространственно-временные профили отраженного ψ_r и прошедшего ψ_t волновых пакетов имеют вид

$$\begin{aligned}\psi_r(z, t) &= \frac{A_0\tau_0}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega_0 t) \times \\ &\times \int r(\omega) \exp\left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2} + i\kappa(\omega)(L - z) - i(\omega - \omega_0)t\right] d\omega,\end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned}\psi_t(z, t) &= \frac{A_0\tau_0}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega_0 t) \times \\ &\times \int t(\omega) \exp\left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2} + i\kappa(\omega)L + ik(\omega)z - i(\omega - \omega_0)t\right] d\omega,\end{aligned} \quad (5.10)$$

где $r(\omega)$ и $t(\omega)$, в соответствии с (5.7), имеют вид

$$r(\omega) = \frac{\kappa(\omega) - k(\omega)}{\kappa(\omega) + k(\omega)}, \quad t(\omega) = \frac{2\kappa(\omega)}{\kappa(\omega) + k(\omega)}.$$

Рассмотрим случай, когда спектральная ширина волнового пакета $\Delta\omega = \langle\omega - \omega_0\rangle$, описывающего состояние падающей частицы, удовлетворяет условию

$$\omega_0 \gg \langle\omega - \omega_0\rangle \approx \frac{1}{\tau_0}, \quad (5.11)$$

тогда $\kappa(\omega)$, в соответствии с (4.86), можно представить в виде разложения:

$$\kappa(\omega) = \kappa(\omega_0) + \frac{1}{v_1}(\omega - \omega_0) + \frac{\beta_1}{2}(\omega - \omega_0)^2, \quad (5.12)$$

где

$$v_1 = c \frac{\sqrt{E_0^2 - m_0^2 c^4}}{E_0}, \quad \beta_1 = -\frac{\hbar m_0^2 c^4}{c(E_0^2 - m_0^2 c^4)^{3/2}}. \quad (5.13)$$

Аналогично,

$$k(\omega) = k(\omega_0) + \frac{1}{v_2}(\omega - \omega_0) + \frac{\beta_2}{2}(\omega - \omega_0)^2, \quad (5.14)$$

где

$$v_2 = \left(\frac{\partial k}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_0} \right)^{-1} = c \frac{\sqrt{(E_0 - U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{E_0 - U_0}, \quad (5.15)$$

$$\beta_2 = \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} \Big|_{\omega=\omega_0} = -\frac{\hbar m_0^2 c^4}{c((E_0 - U_0)^2 - m_0^2 c^4)^{3/2}}.$$

Вне области полного отражения частицы от потенциального барьера (т. е. при $E - m_0 c^2 < U_0$ или $E - m_0 c^2 > U_0$) величины $v_{1,2}$ определяют групповую скорость распространения волнового пакета в областях $z < 0$ и $z > 0$ соответственно.

При выполнении условия (5.11) коэффициенты отражения r и прохождения t могут быть представлены в виде

$$r(\omega) = |r(\omega)| \exp(i\varphi_r(\omega)) \approx$$

$$\approx |r(\omega_0)| \exp \left[i \left(\varphi_r(\omega_0) + \varphi_r'(\omega_0)(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \varphi_r''(\omega_0)(\omega - \omega_0)^2 \right) \right],$$

$$t(\omega) = |t(\omega)| \exp(i\varphi_t(\omega)) \approx$$

$$\approx |t(\omega_0)| \exp \left[i \left(\varphi_t(\omega_0) + \varphi_t'(\omega_0)(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \varphi_t''(\omega_0)(\omega - \omega_0)^2 \right) \right].$$

Поскольку вне области полного отражения ($E - m_0 c^2 < U_0$ или $E - m_0 c^2 > U_0$) коэффициенты r и t являются действительными, то в этих областях получаем

$$r(\omega) \approx |r(\omega_0)|, \quad t(\omega) \approx |t(\omega_0)|.$$

Подставляя приведенные выше разложения в (5.9)–(5.10) и производя интегрирование, в случае когда энергия налетающей частицы лежит вне области полного отражения, для отраженного и прошедшего волновых пакетов получаем

$$|\psi_r(z, t)|^2 = \frac{|A_0|^2 |r(\omega_0)|^2}{\sqrt{1 + \beta_1^2 (L - z)^2 \tau_0^{-4}}} \times \exp \left[- \left(t - \frac{L - z}{v_1} \right)^2 \frac{1}{\tau_0^2 + \beta_1^2 (L - z)^2 \tau_0^{-2}} \right], \quad (5.16)$$

$$|\psi_t(z, t)|^2 = \frac{|A_0|^2 |t(\omega_0)|^2}{\sqrt{1 + (\beta_1 L + \beta_2 z)^2 \tau_0^{-4}}} \times \exp \left[- \left(t - \frac{z}{v_2} - \frac{L}{v_1} \right)^2 \frac{1}{\tau_0^2 + (\beta_1 L + \beta_2 z)^2 \tau_0^{-2}} \right]. \quad (5.17)$$

Таким образом, максимум амплитуды отраженного волнового пакета в точке $z = -d$ достигается в момент времени

$$t_{\max}^{(r)} = \frac{d + L}{v_1}.$$

Поскольку согласно (5.13) $v_1 > 0$, то величина $t_{\max}^{(r)}$ имеет простую и наглядную интерпретацию — это есть суммарное время, необходимое для того, чтобы падающая частица, движущаяся со скоростью v_1 , прошла расстояние L до области скачка потенциала и расстояние d после отражения.

Максимум амплитуды прошедшего волнового пакета в точке $z = d$ достигается в момент времени

$$t_{\max}^{(t)} = \frac{L}{v_1} + \frac{d}{v_2}.$$

Из (5.15) следует, что $v_2 > 0$ при $E_0 > U_0 + m_0 c^2$. Поэтому если энергия налетающей частицы превышает высоту потенциального барьера $\Delta E_0 = E_0 - m_0 c^2 > U_0$ (где, как видно из рис. 5.1, коэффициент прохождения больше нуля), то величина $t_{\max}^{(t)}$, так же как и в случае отражения, имеет простой и наглядный смысл — это есть суммарное время, необходимое для того, чтобы частица прошла расстояние L в области $U(z) = 0$ и расстояние d в области $U(z) = U_0$.

Однако при $E_0 < U_0 - m_0 c^2$ скорость v_2 становится отрицательной:

$$v_2 = -c \frac{\sqrt{(E_0 - U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{U_0 - E_0}.$$

Это означает, что «отрицательная» частица в области $z > 0$ появляется раньше, чем падающая «положительная» частица достигнет области

скачка потенциала, поскольку максимум амплитуды прошедшей волны достигается теперь в момент времени

$$t_{\max}^{(t)} = \frac{L}{v_1} - \frac{d}{|v_2|}.$$

При $v_2 \approx -v_1$ движение античастицы совпадает с зеркально отраженным в плоскости $z = 0$ движением падающей частицы. Это дает основание назвать такую частицу зеркальной частицей.

Графическая демонстрация описанного выше поведения частиц в области $z > 0$ представлена на рис. 5.3, где показаны временные профили $|\psi(z, t)|^2$ для различных значений z . Из рисунка видно, что при энергии налетающей частицы, превышающей величину потенциального скачка $E_0 - m_0 c^2 > U_0$, частица имеет вероятность отразиться от потенциального барьера или же перейти в область $z > 0$, оставаясь в состоянии частицы. При этом в области $z > 0$ она продолжает движение в направлении падающей частицы. Однако при энергии налетающей частицы $E_0 \leq U_0 - m_0 c^2$ характер ее взаимодействия с потенциальным барьером (5.1) кардинально меняется. Частица в области $z > 0$ движется навстречу падающей частице.

Дополнительная иллюстрация указанного поведения частиц в области $z > 0$ представлена на рис. 5.2. Мы видим, что асимптотическая форма решения (5.4) при $z \rightarrow \infty$ приводит к тому, что состояние налетающей частицы, задаваемое точкой a в области $z < 0$, возбуждает состояние, определяемое точкой t_a в области $z > 0$, которое соответствует точке 1 на рис. 4.1, в то время как состояние налетающей частицы, задаваемое точкой b , приводит к возбуждению в области $z > 0$ состояния, определяемого точкой t_b , которое соответствует точке 4 на рис. 4.1. Это состояние относится к отрицательно частотной зоне состояний, поэтому ему соответствует отрицательная величина плотности заряда. Точке 4 соответствует отрицательная величина групповой скорости волнового пакета.

Замечания и выводы:

1. Из формулы (5.17) следует, что в момент времени $t \approx 0$ максимум амплитуды волнового пакета, соответствующего падающей частице, достигается в точке $z_0 = -L$ и имеет пространственную ширину $l_0 = \tau_0 v_1$. В этот же момент времени максимум пространственного профиля волнового пакета, соответствующего зеркальной частице, достигается в точке $z_t = Lv_2/v_1$ и имеет пространственную ширину

$$l_t = v_2 \sqrt{\tau_0^2 + \left(\beta_1 + \beta_2 \frac{v_2}{v_1}\right)^2} \frac{L^2}{\tau_0^2}. \quad (5.18)$$

Следовательно, при $L \rightarrow \infty$ ширина пространственного профиля волнового пакета, соответствующего зеркальной частице, стремится к бесконечности. Из полученной формулы следует ряд важных следствий.

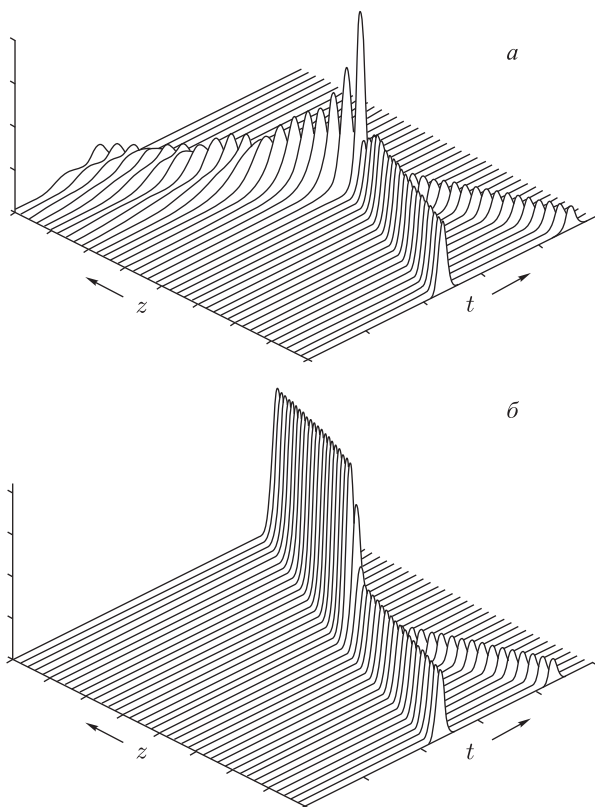


Рис. 5.3. Пространственно-временная динамика эволюции волнового пакета при энергии налетающей частицы: $E = 1,9 \cdot m_0 c^2$ (а) и $E = 4,5 \cdot m_0 c^2$ (б). Координата z меняется в пределах $-3l \leq z \leq 3l$, пространственный размер падающего волнового пакета $l = 10\lambda_C$, где λ_C — комптоновская длина волны частицы

Во-первых, если пространственно локализованное состояние падающей частицы сформировано достаточно далеко от области скачка потенциала, то состояние зеркальной частицы не является пространственно локализованным.

Во-вторых, временные профили падающего волнового пакета и индуцированного им волнового пакета зеркальных частиц совпадают лишь в области скачка потенциала $z = 0$, где в результате их частичной аннигиляции формируется волновой пакет, соответствующий отраженной частице.

В-третьих, характерным пространственным масштабом, на котором происходит образование пространственно локализованного состояния зеркальной частицы, является длина дифракционного расплывания $l_d^{(t)}$,

которая, по аналогии с (4.93), определяется из условия равенства первого и второго слагаемых в подкоренном выражении формулы (5.18). Отсюда получаем

$$l_d^{(t)} = \tau_0^2 \left/ \left| \beta_1 + \beta_2 \frac{v_2}{v_1} \right| \right. . \quad (5.19)$$

Следовательно, состояние зеркальной частицы становится пространственно локализованным лишь вблизи области скачка потенциала.

2. Как мы отмечали в разделе 4.2.3, при движении частицы во внешних пространственно неоднородных полях знак энергии частицы не определяет ее принадлежности к зоне положительности или отрицательно частотных решений. Более фундаментальным фактом является наличие двух зон состояний, отделенных друг от друга энергетическим зазором $\Delta E = 2m_0c^2$. Именно наличие энергетического зазора и конечное значение его величины дают принципиальную возможность появления новых состояний. Исследование пространственно-временной динамики формирования и распространения волновых пакетов, отвечающих этим новым состояниям, дает основания для введения термина «зеркальная частица», поскольку проведенное исследование наглядно демонстрирует различие в физических свойствах частиц, находящихся в стационарных состояниях с энергией E , в областях пространства, где $E < U(\mathbf{r})$ и $E > U(\mathbf{r})$. К этому выводу, впрочем, можно прийти и из непосредственного анализа выражения для временной компоненты 4-вектора плотности потока (см. (4.5)–(4.8)). Действительно, знак плотности заряда частицы в каждой точке пространства определяется не величиной E , а разностью $E - U(\mathbf{r})$.

3. Отметим, что в измерениях астрофизического масштаба резкое падение коэффициента отражения при энергии налетающей частицы, лежащей в области $0 < \Delta E < U_0 - 2m_0c^2$, воспринимается как появление «черной дыры».

5.1.3. Прямоугольный потенциальный барьер. Рассмотрим рассеяние частицы на прямоугольной потенциальной ступеньке конечных пространственных размеров:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ U_0, & 0 \leq z \leq l, \\ 0, & z > l. \end{cases} \quad (5.20)$$

Пусть частица налетает на потенциальный барьер слева, тогда пространственная часть волновой функции, удовлетворяющая асимптотическим граничным условиями (5.4), имеет вид

$$\psi(z) = \begin{cases} A \exp(ikz) + B \exp(-ikz), & z < 0, \\ C \exp(ikz) + D \exp(-ikz), & 0 \leq z \leq l, \\ E \exp(ikz), & z > l, \end{cases} \quad (5.21)$$

где

$$\kappa = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}, \quad k = \frac{\sqrt{(E - U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}.$$

Условия непрерывности волновой функции и ее производной в области скачков потенциала приводят нас к следующим равенствам:

$$\begin{aligned} -B + C + D &= A, \\ B + C \frac{k}{\kappa} - D \frac{k}{\kappa} &= A, \\ C \exp(ikl) + D \exp(-ikl) - E \exp(i\kappa l) &= 0, \\ C \frac{k}{\kappa} \exp(ikl) - D \frac{k}{\kappa} \exp(-ikl) - E \exp(i\kappa l) &= 0. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Решение системы уравнений (5.22) имеет вид

$$\begin{aligned} B &= A \frac{(\kappa^2 - k^2) (\exp(i2kl) - 1)}{(\kappa - k)^2 \exp(i2kl) - (\kappa + k)^2}, \\ C &= -A \frac{2\kappa(\kappa + k)}{(\kappa - k)^2 \exp(i2kl) - (\kappa + k)^2}, \\ D &= A \frac{2\kappa(\kappa - k) \exp(i2kl)}{(\kappa - k)^2 \exp(i2kl) - (\kappa + k)^2}, \\ E &= -A \frac{4\kappa k \exp[i(k - \kappa)l]}{(\kappa - k)^2 \exp(i2kl) - (\kappa + k)^2}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Учитывая (5.21), для амплитудных коэффициентов отражения r и прохождения t получаем

$$r = \frac{B}{A} = \frac{r_1 (1 - \exp(i2kl))}{1 - r_1^2 \exp(i2kl)}, \quad t = \frac{E}{A} = \frac{t_1 t_2 \exp[i(k - \kappa)l]}{1 - r_1^2 \exp(i2kl)}, \quad (5.24)$$

где

$$r_1 = \frac{\kappa - k}{\kappa + k}, \quad t_1 = \frac{2\kappa}{\kappa + k}, \quad t_2 = \frac{2k}{\kappa + k}.$$

Коэффициенты r_1 и t_1 совпадают с амплитудными коэффициентами отражения и прохождения в случае падения частицы на потенциальную ступеньку, а коэффициент t_2 является коэффициентом прохождения для той же задачи, но в случае, когда частица падает на ступеньку из области ненулевого потенциала. Поведение энергетических коэффициентов отражения $R = |r|^2$ и прохождения $T = |t|^2$ качественно совпадает с аналогичными зависимостями, представленными на рис. 5.1. Отличие состоит лишь в том, что вне области полного отражения, т. е. при $m_0 c^2 < E < U_0 - m_0 c^2$ и $E > U_0 + m_0 c^2$, появляются интерференционные максимумы коэффициента прохождения, положение которых определяется из условия

$$k_n = \frac{\pi n}{l}.$$

Коэффициент отражения при соответствующих значениях энергии обращается в нуль. Кривые, представленные на рис. 5.1, в указанных

энергетических областях играют роль огибающих пиков получающихся зависимостей.

5.1.4. Прямоугольная потенциальная яма. Решения, полученные в предыдущем разделе, справедливы при любом знаке U_0 в (5.20). Однако выше мы обсуждали случай, когда $U_0 > 0$, и потому энергия частицы $E \geq m_0 c^2$. При отрицательном знаке $U_0 = -|U_0|$ наряду с решениями, удовлетворяющими условию $E \geq m_0 c^2$, появляются решения, отвечающие собственным значениям энергии $E < m_0 c^2$. При глубине потенциальной ямы $|U_0| < 2m_0 c^2$ эти решения отвечают связанным состояниям частицы в потенциальной яме. Собственные значения энергии связанных уровней можно найти из условия обращения в нуль детерминанта системы уравнений (5.22) при неизвестных коэффициентах B, C, D, E . Равенство нулю детерминанта означает, что система линейных алгебраических уравнений (5.22) имеет нетривиальные решения при нулевой амплитуде падающей волны, $A = 0$. Указанный детерминант определяется выражением

$$\text{Det} = (\kappa + k)^2 - (\kappa - k)^2 \exp(i2kl) = (\kappa + k)^2 [1 - r_1^2 \exp(i2kl)].$$

При $E < m_0 c^2$ волновой вектор κ становится чисто мнимым:

$$\kappa = i\varepsilon = i \frac{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}}{\hbar c}, \quad (5.25)$$

и условие обращения в нуль детерминанта принимает вид

$$i\varepsilon [\exp(ikl) \mp 1] = k [\exp(ikl) \pm 1]. \quad (5.26)$$

Путем несложных преобразований из (5.26) получаем

$$\sin\left(\frac{kl}{2} - \delta\right) = 0, \quad (5.27a)$$

$$\cos\left(\frac{kl}{2} - \delta\right) = 0, \quad (5.27b)$$

где

$$\sin \delta = \frac{\varepsilon}{\sqrt{k^2 + \varepsilon^2}}. \quad (5.28)$$

Таким образом, собственные значения энергии определяются решением следующих трансцендентных уравнений:

$$\frac{k_n^{(1)} l}{2} - \delta_n = \pi n, \quad (5.29a)$$

$$\frac{k_n^{(2)} l}{2} - \delta_n = \frac{\pi}{2}(2n + 1), \quad (5.29b)$$

где n — целое число.

Волновая функция частицы в пределах потенциальной ямы имеет в этом случае вид

$$\psi(z) = B \frac{\cos(kz - \delta)}{\cos \delta}.$$

Следовательно, для решений (5.29а) получаем

$$\psi(0) = \psi(l) = B,$$

а для решений (5.29б)

$$\psi(0) = -\psi(l) = B.$$

Отсюда следует, что собственные значения (5.29а) отвечают четным относительно координаты $z' = z - l/2$ волновым функциям, а собственные значения (5.29б) — нечетным.

При небольшой глубине потенциальной ямы, $U_0 \ll m_0 c^2$, как следует из (5.28), $\delta \approx 0$ и корни уравнения (5.29а) легко находятся. Формально математическое решение уравнения (5.29а) имеет, например, в этом случае вид

$$E_n^{(\pm)} \approx -|U_0| \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + \left(\frac{2\pi\hbar c}{L} n\right)^2}. \quad (5.30)$$

Однако условиям задачи отвечают только собственные значения со знаком плюс перед корнем:

$$E_n \approx -|U_0| + \sqrt{m_0^2 c^4 + \left(\frac{2\pi\hbar c}{L} n\right)^2}. \quad (5.31)$$

Такой выбор знака связан с тем, что решения (5.29) получены из уравнения (5.26), которое имеет нетривиальные решения лишь в случае, когда $\text{Im}(\kappa) \neq 0$. При энергии падающей частицы $E < -m_0 c^2$ волновой вектор κ становится действительным.

Графическая интерпретация указанного выбора знака представлена на рис. 5.4. На этом рисунке точки A, B, C, D, E отвечают состояниям с соответствующими амплитудами волн в волновой функции (5.21), т.е. падающая частица (точка A) имеет положительную энергию в области $z < 0$ и распространяется в положительном направлении оси z . Если частица имеет отрицательную энергию в области $z < 0$ и распространяется в положительном направлении оси z , то ее состояние задается точкой A' и точки, эквивалентные точкам B, C, D, E , обозначены теми же буквами со штрихами.

Если теперь мы поместим частицу в состояние, обозначенное точкой 1 на рис. 5.4, то она образует связанное состояние, являющееся суперпозицией состояний 1 и 3 , в областях $z < 0$ и $z > l$ этим состояниям отвечают мнимые значения волнового вектора, $\text{Re}(\kappa) = 0$. Напротив, если мы рассмотрим частицу, имеющую ту же по величине, но отрицательную энергию, то она не образует связанного состояния, поскольку ее состояние в области $0 \leq z \leq l$ описывается теперь точкой 2 . При отражении от границ потенциальной «ямы» это состояние возбуждает состояние, характеризуемое точкой 4 , а вне области $0 \leq z \leq l$ возбуждаются состояния $2'$ и $4'$, которым соответствует действительная величина волнового вектора κ ($\text{Re}(k_{2'}) > 0$ и $\text{Re}(k_{4'}) > 0$).

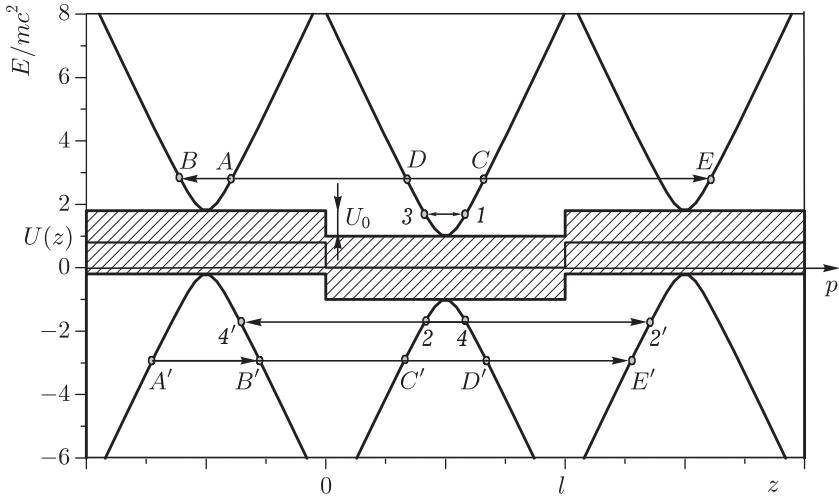


Рис. 5.4. Пространственный профиль запрещенной зоны и вид гиперплоскости состояний частицы в различных пространственных областях

Выше мы полагали, что $|U_0| \leq 2m_0c^2$. Структура энергетических поверхностей, соответствующая случаю $|U_0| > 2m_0c^2$, графически представлена на рис. 5.5. Несложно видеть, что собственные значения E_n , отвечающие связанным состояниям частицы, могут лежать лишь в области $-m_0c^2 \leq E_n \leq m_0c^2$, что непосредственно следует из определения волнового вектора κ (см., например, (5.25)). Эти состояния обозначены темными точками на рис. 5.5. Области собственных значений $-|U_0| + m_0c^2 \leq E_n \leq -m_0c^2$ отвечают реальным значениям как волнового вектора κ , так и волнового вектора k . Следовательно, спектр собственных значений является в указанной области непрерывным и состояние частицы не является связанным. Уровни дискретного спектра частицы не являются в этом случае стабильными, взаимодействие с внешними нестационарными электромагнитными полями приводит к их переходам на нижние уровни непрерывного спектра, которые на рис. 5.5 обозначены светлыми точками. Таким образом, представленная модель показывает, что в электростатическом поле с достаточно резким скачком потенциала $d\varphi/dz \rightarrow \infty$ и величиной скачка, удовлетворяющей условию $q_0(\varphi_{\max} - \varphi_{\min}) > 2m_0c^2$, в присутствии внешнего электромагнитного поля становится возможной трансформация материального поля из состояния, отвечающего частице, в суперпозиционное состояние. Отметим, что модель прямоугольной потенциальной ямы конечной пространственной ширины с указанными требованиями к скачку потенциала является достаточно искусственной, поэтому мы ограничимся здесь лишь приведенным выше качественным обсуждением и не будем проводить конкретных расчетов. Более реалистичное представление

о специфике спектра связанных состояний частицы нам даст решение задачи о движении частицы в кулоновском поле, которое будет получено в настоящей главе.

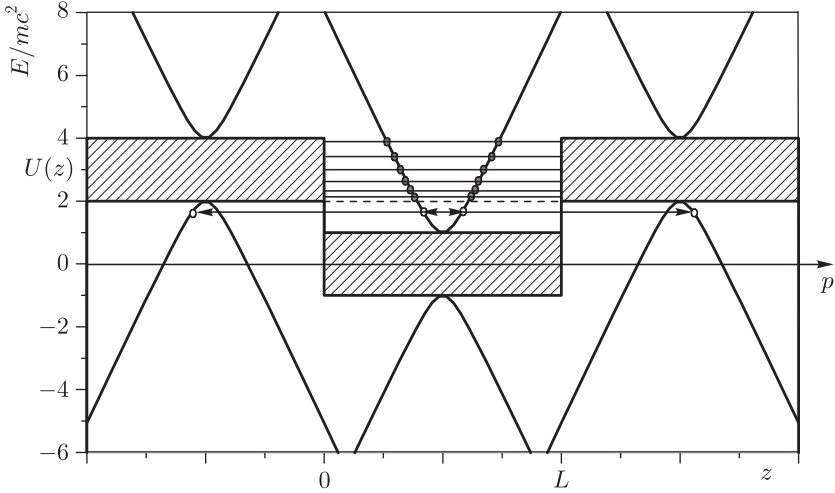


Рис. 5.5. Пространственный профиль запрещенной зоны и вид гиперплоскости состояний частицы в различных пространственных областях в случае, когда глубина потенциальной ямы превышает удвоенную массу покоя частицы

5.1.5. Условие возникновения зеркальных частиц. Модель прямоугольной потенциальной ступеньки и прямоугольной потенциальной ямы позволяют наглядно интерпретировать специфику взаимодействия частицы с внешними полями. Однако эти модели становятся достаточно грубыми, когда величина скачка потенциальной энергии превышает удвоенную массу покоя частицы. Обратимся к анализу более реалистичной модели, учитывающей конечность размеров области, где происходит изменение потенциала. В качестве такой модели можно рассмотреть следующую:

$$U(z) = \frac{U_0}{2}(1 + \text{th } \beta z). \quad (5.32)$$

Потенциальная энергия меняется от значения $U(-\infty) = 0$ до значения $U(\infty) = U_0$, а величина $l = \beta^{-1}$ определяет пространственный размер области, в пределах которой происходит плавное изменение потенциальной энергии.

Уравнение (4.14) принимает в этом случае вид

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 - \frac{EU_0}{\hbar^2 c^2}(1 + \text{th } \beta z) + \frac{U_0^2}{4\hbar^2 c^2}(1 + \text{th } \beta z)^2 \right] u(z) = 0, \quad (5.33)$$

где

$$\kappa = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}.$$

Введем новую неизвестную функцию

$$u(z) = (1 + \operatorname{th} \beta z)^{-ik_1/2} (1 - \operatorname{th} \beta z)^{-ik_2/2} p(z)$$

и новую переменную

$$x = \operatorname{th} \beta z.$$

Тогда уравнение (5.33) преобразуется к следующему виду:

$$(1 - x^2) p''(x) + (-ik_1 + ik_2 - (2 - ik_1 - ik_2)x) p'(x) + \frac{1}{2} \left(\frac{(k_1 + k_2)^2}{2} + ik_1 + ik_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{U_0}{\hbar c \beta} \right)^2 \right) p(x) = 0, \quad (5.34)$$

где

$$k_1 = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c \beta}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{(E - U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c \beta}.$$

Учитывая, что уравнение (5.34) имеет вид уравнения для гипергеометрических функций, общее решение уравнения (5.33) можно записать в следующем виде:

$$u(z) = C_1 (2 \operatorname{ch} \beta z)^{i(k_1 + k_2)/2} \exp \left(-i \frac{k_1 - k_2}{2} \beta z \right) \times \\ \times F \left(-s - i \frac{k_1 + k_2}{2}, 1 + s - i \frac{k_1 + k_2}{2}, 1 - ik_2, \eta \right) + \\ + C_2 (2 \operatorname{ch} \beta z)^{i(k_1 - k_2)/2} \exp \left(-i \frac{k_1 + k_2}{2} \beta z \right) \times \\ \times F \left(-s - i \frac{k_1 - k_2}{2}, 1 + s - i \frac{k_1 - k_2}{2}, 1 + ik_2, \eta \right), \quad (5.35)$$

где

$$s = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - \left(\frac{U_0}{\hbar c \beta} \right)^2} - 1 \right) \quad (5.36)$$

и

$$\eta = \frac{1}{1 + \exp(2\beta z)}.$$

Асимптотическая форма решения (5.35) при $z \rightarrow \infty$ имеет вид

$$u(z) = C_1 \exp(ik_2 \beta z) + C_2 \exp(-ik_2 \beta z).$$

Перепишем величину k_2 в следующем тождественном виде:

$$k_2(E) = \frac{(E - U_0)}{\hbar c \beta} \sqrt{1 - \frac{m_0^2 c^4}{(E - U_0)^2}}.$$

Следовательно, при $E > U_0$ требуемой асимптотической форме при $z \rightarrow \infty$ отвечает первое линейно независимое решение в (5.35), а при $E < U_0$ — второе, поскольку в этой области $k_2(E)$ отрицательно. Несложно видеть, однако, что при замене $k_2 \rightarrow -k_2$ второе линейно независимое решение в (5.35) совпадает с первым, поэтому мы можем выбрать общее решение в виде (5.35) с коэффициентом $C_2 = 0$, полагая

при этом, что $k_2(E)$ является положительным при всех значениях E . В этом случае асимптотическая форма решения (5.35) при $z \rightarrow -\infty$ имеет вид

$$u(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \frac{\Gamma(1 - ik_2)\Gamma(-ik_1)}{\Gamma(1 + s - i(k_1 + k_2)/2)\Gamma(-s - i(k_1 + k_2)/2)} \exp(ik_1\beta z) + \\ + \frac{\Gamma(1 - ik_2)\Gamma(ik_1)}{\Gamma(1 + s + i(k_1 - k_2)/2)\Gamma(-s + i(k_1 - k_2)/2)} \exp(-ik_1\beta z). \quad (5.37)$$

Окончательно для волновой функции, удовлетворяющей граничным условиям (5.4), получаем выражение

$$u(z) = t(2 \operatorname{ch} \beta z)^{i(k_1+k_2)/2} \exp\left(-i\frac{k_1 - k_2}{2}\beta z\right) \times \\ \times F\left(-s - i\frac{k_1 + k_2}{2}, 1 + s - i\frac{k_1 + k_2}{2}, 1 - ik_2, \eta\right).$$

Амплитудные коэффициенты отражения r и прохождения t определяются следующими выражениями:

$$r = \frac{\Gamma\left(1 + s - i\frac{k_1 + k_2}{2}\right)\Gamma\left(-s - i\frac{k_1 + k_2}{2}\right)\Gamma(ik_1)}{\Gamma\left(1 + s + i\frac{k_1 - k_2}{2}\right)\Gamma\left(-s + i\frac{k_1 - k_2}{2}\right)\Gamma(-ik_1)}, \quad (5.38)$$

$$t = \frac{\Gamma\left(1 + s - i\frac{k_1 + k_2}{2}\right)\Gamma\left(-s - i\frac{k_1 + k_2}{2}\right)}{\Gamma(-ik_1)\Gamma(1 - ik_2)}. \quad (5.39)$$

В случае когда параметр s , определенный равенством (5.36), является действительным, т. е. $U_0 \leq \hbar c\beta$, для энергетических коэффициентов отражения $R = |r|^2$ и прохождения $T = |t|^2 \operatorname{Re}(k_2)/k_1$ получаем¹⁾

$$R = \frac{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 - K_2)/2)}{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2)}, \quad (5.40)$$

$$T = \frac{\operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2) - \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 - K_2)/2)}{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2)}, \quad (5.41)$$

где

$$K_2 = \operatorname{Re}(k_2).$$

Несложно видеть, что

$$R + T \equiv 1.$$

Качественное отличие формул (5.38) и (5.39) от формул (5.7) состоит в том, что в формулах (5.38) и (5.39) появляется новый параметр

$$\delta_C = \frac{m_0 c}{\hbar \beta} = \frac{k_C}{\beta} = k_C l, \quad (5.42)$$

¹⁾ В общем случае формулы (5.40) и (5.41) совпадают по виду с формулами (9.22) и (9.23), поэтому условие $U_0 \leq \hbar c\beta$ не является необходимым. Мы его использовали здесь исключительно в целях компактности записи формул.

определяющий пространственную протяженность области скачка потенциала $l = \beta^{-1}$ в единицах комптоновской длины волны частицы $\lambda_C = 2\pi/k_C$ (точнее в единицах $\lambda_C = k_C^{-1}$). При бесконечно узкой ширине области скачка потенциала формулы (5.40) и (5.41) совпадают с формулами (5.8). С ростом параметра δ_C энергетические зависимости коэффициентов R и T начинают отличаться от соответствующих зависимостей, показанных на рис. 5.1. Характер изменения зависимостей коэффициентов отражения и прохождения по мере увеличения параметра δ_C показан на рис. 5.6. На этом рисунке пунктирными линиями показаны зависимости для случая $\delta_C = 0,01$ при той же величине потенциального барьера, что и на рис. 5.1 ($U_0 = 3m_0c^2$). Пунктирные кривые полностью совпадают с кривыми (б), (г) на рис. 5.1. Кривые 1, 2, и 3 на рис. 5.6 соответствуют значениям параметра $\delta_C = 0,1$ (кривые 1), 1 (кривые 2), 3 (кривые 3). Несложно видеть, что при $k_C l = 3$ зеркальных частиц в области $z > 0$ не появляется, а падающая частица полностью отражается от потенциального барьера, если ее энергия меньше высоты потенциального барьера: $\Delta E = E - m_0c^2 \leq U_0$. Таким образом, отношение пространственной ширины потенциального барьера к комптоновской длине волны частицы является важнейшим параметром, определяющим возможность возбуждения состояний зеркальных частиц.

Замечания и выводы:

1. Результаты, полученные выше, наглядно демонстрируют, что анализ задачи о движении частицы в пространственно неоднородном электростатическом поле, основанный на решении волнового уравнения со второй производной по времени, приводит к результатам, качественно отличающимся как от решений нерелятивистских уравнений, так и релятивистских уравнений с первой производной по времени. Основа возникающих различий обусловлена тем, что учет второй производной приводит к возникновению двух зон состояний, отделенных друг от друга запрещенной зоной. Таким образом, понятие запрещенной зоны является краеугольным элементом теории.

2. В рамках нерелятивистских теорий изменение скалярного потенциала на произвольную величину не приводит к качественным изменениям в характере движения частицы, поскольку ширина запрещенной зоны является в этом случае бесконечной.

Аналогичная ситуация возникает и в рамках релятивистских теорий, учитывающих лишь положительно частотную зону состояний, поскольку в этом случае полагается, что отрицательно частотные решения соответствуют античастице, понимаемой как зарядово-сопряженная частица. Более принципиальное отличие состоит в том, что в этом случае частица и античастица описываются двумя различными уравнениями, поэтому анализ их взаимодействия может проводиться лишь в рамках двухчастичных теорий.

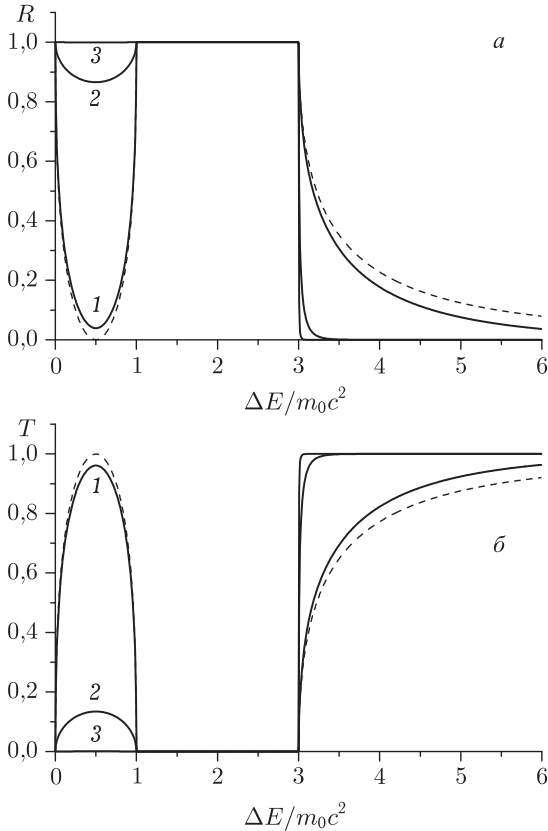


Рис. 5.6. Зависимость коэффициентов отражения R (а) и прохождения T (б) от энергии налетающей частицы при той же величине потенциального барьера, что и на рис. 5.1 ($U_0 = 3m_0c^2$), и пространственном размере области скачка потенциала $\delta_C = k_C/\beta = k_C l$, равной $\delta_C = 0,01$ (пунктирные линии), $\delta_C = 0,1$ (кривые 1), 1 (кривые 2), 3 (кривые 3). Несложно видеть, что при $k_C l = 3$ зеркальных частиц в области $z > 0$ не появляется, а падающая частица полностью отражается от потенциального барьера, если ее энергия меньше высоты потенциального барьера: $\Delta E = E - m_0c^2 \leq U_0$

3. Напротив, общее решение уравнений со второй производной по времени является суперпозицией положительно и отрицательно частотных решений, поэтому процессы с изменением числа частиц описываются в рамках одночастичной теории. Такие суперпозиционные состояния возникают лишь в пространственно неоднородном внешнем поле. Как мы видели выше, это суперпозиционное состояние возникает лишь тогда, когда пространственная ширина запрещенной зоны состояний, отделяющая область положительно и отрицательно частотных состояний, имеет порядок комптоновской длины волны частицы, а величина

скачка потенциала превышает удвоенную массу покоя частицы. В противном случае (т. е. при невыполнении указанных условий) частицы, находящиеся в областях пространства $U(\mathbf{r}) = 0$ и $U(\mathbf{r}) = U_0$, энергией не обмениваются и существуют независимо друг от друга.

4. В явлениях астрофизического масштаба наличие пространственных областей раздельного существования частиц и зеркальных частиц воспринимается как наличие «темной материи». На рис. 5.7 показан пространственный профиль запрещенной зоны в случае потенциала, определяемого выражением (5.32). Для наблюдателя, проводящего измерения в полупространстве $z < 0$, частицы, состояния которых принадлежат области со штриховкой влево, находятся в скрытом секторе пространства и воспринимаются как частицы темной материи. Частицы, находящиеся в области со штриховкой вправо, воспринимаются либо как зеркальные частицы, если пространственная ширина области скачка потенциала удовлетворяет условию $k_{Cl} < 3$, либо как частицы темной материи — в случае обратного неравенства. Аннигиляция частицы и зеркальной частицы воспринимается наблюдателем как появление «черной дыры».

5.2. Сохранение заряда в процессе взаимодействия частицы и зеркальной частицы

Законы сохранения заряда и энергии являются одними из наиболее строгих законов сохранения и, как показывают результаты экспериментальных исследований, заведомо выполняются в процессах взаимодействия элементарных частиц. Поэтому остановимся на их обсуждении более подробно.

5.2.1. Гауссовские волновые пакеты. Обсуждая условия нормировки волновых функций непрерывного спектра, мы неоднократно обращались к закону сохранения заряда, подразумевая при этом, что заряд сохраняется в бесконечно большом пространственном объеме. Однако понятие бесконечно большого объема является такой же математической абстракцией, как и понятие плоской волны. Бóльшим физическим смыслом обладают состояния частиц в виде волновых пакетов. Как мы показали выше, волновые пакеты распространяются с конечной групповой скоростью, величина которой меньше скорости света, поэтому мы можем пользоваться граничными условиями на поверхности конечного четырехмерного объема. Действительно, проинтегрируем уравнение непрерывности (4.5) по 4-объему $\Delta\Omega = V\Delta t$:

$$\int \frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} d\Omega = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \left(\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} \right) dV dt = 0.$$

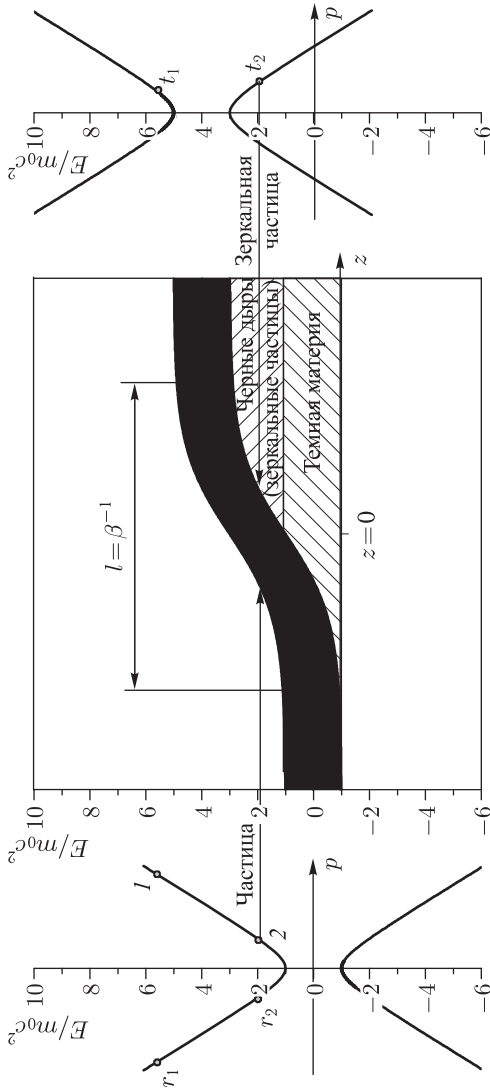


Рис. 5.7. Пространственный профиль запрещенной зоны состояний (область, закрашенная черным цветом) и области существования зеркальных частиц (штриховка вправо) и темной материи (штриховка влево) для наблюдателя, находящегося в полупространстве $z < 0$

Отсюда получаем

$$q(t_2) - q(t_1) = - \int_{t_1}^{t_2} \int_S \mathbf{j} d\mathbf{S} dt,$$

где S — поверхность, ограничивающая объем V , и

$$q(t) = \int_V \rho(\mathbf{r}, t) dV.$$

Полагая, что каждая из монохроматических компонент волнового пакета $\psi(\mathbf{r}, t) = \int \psi_\omega(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) d\omega$ является решением стационарной задачи рассеяния, а следовательно, удовлетворяет граничному условию $\int_S \mathbf{j}_\omega d\mathbf{S} = 0$, получаем

$$q(t_2) - q(t_1) = - \int_{t_1}^{t_2} \int_S \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{S} dt = \int \int_S \mathbf{j}_\omega(\mathbf{r}) d\mathbf{S} d\omega = 0. \quad (5.43)$$

Рассмотрим рассеяние волнового пакета на потенциальной ступеньке (5.32). Асимптотический вид волновых функций падающей ψ_0 , отраженной ψ_r и прошедшей ψ_t волн совпадает с видом соответствующих волновых функций для рассеяния на прямоугольной потенциальной ступеньке. Пусть волновой пакет имеет среднюю энергию $E_0 = \hbar\omega_0$, а длительность τ_0 удовлетворяет условию $\omega_0\tau_0 \gg 1$. В этом случае для плотности заряда вдали от области скачка потенциала согласно формулам раздела 5.1.2 получаем

$$\begin{aligned} \rho_0(z, t) &= q_0 \frac{E_0}{m_0 c^2} \frac{|A_0|^2}{\sqrt{1 + \beta_1^2 (L+z)^2 \tau_0^{-4}}} \times \\ &\quad \times \exp \left[- \left(t - \frac{L+z}{v_1} \right)^2 \frac{1}{\tau_0^2 + \beta_1^2 (L+z)^2 \tau_0^{-2}} \right], \\ \rho_r(z, t) &= q_0 \frac{E_0}{m_0 c^2} \frac{|A_0|^2 |r(\omega_0)|^2}{\sqrt{1 + \beta_1^2 (L-z)^2 \tau_0^{-4}}} \times \\ &\quad \times \exp \left[- \left(t - \frac{L-z}{v_1} \right)^2 \frac{1}{\tau_0^2 + \beta_1^2 (L-z)^2 \tau_0^{-2}} \right], \\ \rho_t(z, t) &= q_0 \frac{E_0 - U_0}{m_0 c^2} \frac{|A_0|^2 |t(\omega_0)|^2}{\sqrt{1 + (\beta_1 L + \beta_2 z)^2 \tau_0^{-4}}} \times \\ &\quad \times \exp \left[- \left(t - \frac{z}{v_2} - \frac{L}{v_1} \right)^2 \frac{1}{\tau_0^2 + (\beta_1 L + \beta_2 z)^2 \tau_0^{-2}} \right]. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Использованные здесь обозначения совпадают с обозначениями раздела 5.1.2. В качестве момента времени t_1 в (5.43) выберем мо-

мент времени, когда падающая частица находится на расстоянии d_1 от скачка потенциала, значительно превышающем пространственный размер падающего волнового пакета. В качестве момента времени t_2 возьмем момент времени, когда отраженная частица находится на расстоянии d_2 от скачка потенциала, значительно превышающем пространственный размер отраженного волнового пакета. Как мы отмечали ранее, в качестве точки $z_0 = -L$ можно выбрать любую точку, лежащую в области $U(z) \approx 0$. Величина L , естественно, должна быть больше $d_{1,2}$. Таким образом, учитывая конечность области скачка потенциала, моменты времени $t_{1,2}$ следует выбирать из соображений, что $L > d_{1,2} \gg c\tau(0) + \beta^{-1}$, где $\tau(z)$ определяет временную длительность волнового пакета в точке z (см. раздел 4.2.2).

Интегрируя (5.44) по пространству и учитывая, что

$$v_1 = \frac{k_1(\omega_0)\hbar c^2}{E_0}, \quad v_2 = \frac{k_2(\omega_0)\hbar c^2}{E_0 - U_0},$$

для заряда в указанные моменты времени получаем

$$q(t) = q_0 \left[I(t) + R(t) + \frac{E_0 - U_0}{|E_0 - U_0|} T(t) \right].$$

В случае $E_0 > U_0$

$$I(t) = \theta(-t'), \quad R(t) = |r(\omega_0)|^2 \theta(t'), \quad T(t) = \frac{K_2}{k_1} |t(\omega_0)|^2 \theta(t'), \quad (5.45a)$$

а в случае $U_0 > 2m_0c^2$ и $m_0c^2 < E < U_0 - m_0c^2$

$$I(t) = \theta(-t'), \quad R(t) = |r(\omega_0)|^2 \theta(t'), \quad T(t) = \frac{K_2}{k_1} |t(\omega_0)|^2 \theta(-t'), \quad (5.45b)$$

где

$$t' = t - \frac{L}{v_1},$$

а $\theta(t)$ — ступенчатая функция:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ 1, & t > 0. \end{cases}$$

Подставляя (5.45а) в (5.43), получаем

$$q_0(R + T) = q_0.$$

Подстановка (5.45б) в (5.43) приводит нас к следующему выражению:

$$q_0R = q_0 - q_0T,$$

где энергетические коэффициенты отражения R и прохождения T , как видно из (5.45), определяются формулами (5.40) и (5.41). Следовательно, в обоих случаях получаем

$$q_0 = q_0(R + T). \quad (5.46)$$

Поскольку энергетические коэффициенты отражения и прохождения удовлетворяют соотношению $R + T = 1$, то последнее соотношение имеет смысл закона сохранения заряда.

Таким образом, в соответствии с вероятностной интерпретацией квантовой механики при $U_0 < 2m_0c^2$ частица имеет вероятность либо отразиться от скачка потенциала, либо перейти в область с большей потенциальной энергией, оставляя в обоих случаях неизменным числа частиц в положительно частотной зоне состояний. С другой стороны, в случае $U_0 > 2m_0c^2$ частица имеет вероятность либо отразиться от скачка потенциала, не изменив при этом числа частиц в положительно частотной зоне состояний, либо аннигилировать. При аннигиляции частицы в области скачка потенциала число частиц, находящихся как в положительно, так и в отрицательно частотных зонах состояний, изменяется, однако полный заряд в пространственно-временной области, включающей указанное событие, остается неизменным.

Полученные соотношения позволяют дать наглядную интерпретацию понятия отрицательной энергии. Действительно, учитывая соотношение (4.45), мы видим, что замена $q_0 \rightarrow E_0$ приводит нас к закону сохранения энергии. В случае рождения зеркальных частиц соотношение принимает вид

$$E_0 - E_0T = E_0R.$$

Как мы уже отмечали выше, несмотря на положительность частоты зеркальной частицы $\omega_0 = E_0/\hbar$, ее энергия, определяемая в общем случае соотношением (4.48), а в стационарных внешних полях соотношением (4.72), является отрицательной. Последнее равенство означает, что в случае аннигиляции частицы в стационарных внешних полях общая энергия материального поля в пространственно-временной области, включающей исследуемое событие, остается неизменной.

5.2.2. Произвольные волновые пакеты. При выводе соотношения (5.46) мы использовали приближенные формулы (5.44). Однако это было сделано исключительно в целях наглядности. Закон сохранения заряда является строгим и не зависит от временного профиля падающего волнового пакета или каких-либо ограничений на его длительность. Рассмотрим движение частицы в пространственно неоднородном электростатическом поле с потенциальной энергией $U(z)$, имеющей следующий асимптотический вид: $U(z)|_{z \rightarrow -\infty} = 0$ и $U(z)|_{z \rightarrow \infty} = U_0$, а центр области скачка потенциала определяется координатой $z = 0$. Волновая функция для произвольного временного профиля падающего волнового пакета определяется выражением (4.82), поэтому для заряда в 4-объеме $\Delta\Omega$ имеем

$$q(t) = \frac{q_0}{m_0c^2} \int_{-L}^L \int d\omega \int d\omega' a^*(\omega) a(\omega') \frac{u_\omega^*(z)}{u_\omega^*(z_0)} \frac{u_{\omega'}(z)}{u_{\omega'}(z_0)} \left(\frac{\hbar\omega + \hbar\omega'}{2} - U(z) \right) \times \exp[i(\omega - \omega')t] dz.$$

Воспользуемся следующей формулой:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp [i(k(\omega) - k(\omega')) z] dz = 2\pi \delta(k - k') = \frac{2\pi}{|\partial k / \partial \omega|} \delta(\omega - \omega'), \quad (5.47)$$

тогда, учитывая асимптотический вид волновых функций (5.4) и выбирая моменты времени $t_{1,2}$ в соответствии с вышеприведенными условиями, для пространственного интеграла, определяющего заряд падающей частицы получаем

$$\begin{aligned} \int_{-L}^0 \exp [i(k(\omega) - k(\omega')) z] dz &= \theta(t') \int_{-\infty}^{\infty} \exp [i(k(\omega) - k(\omega')) z] dz = \\ &= 2\pi \theta(t') \delta(k - k') = \frac{2\pi}{|\partial k / \partial \omega|} \theta(t') \delta(\omega - \omega'). \end{aligned}$$

Окончательно, для заряда в выбранной области 4-объема получаем

$$\begin{aligned} q(t) = q_0 \left[\theta(-t') \int |A(\omega)|^2 d\omega + \theta(t') \int |A(\omega)|^2 R(\omega) d\omega + \right. \\ \left. + \theta(t' \operatorname{sgn}(\hbar\omega - U_0)) \int |A(\omega)|^2 \frac{\hbar\omega - U_0}{|\hbar\omega - U_0|} T(\omega) d\omega \right], \quad (5.48) \end{aligned}$$

где в соответствии с условием нормировки

$$\int |A(\omega)|^2 d\omega = \frac{2\pi}{m_0 c} \int |a(\omega)|^2 \sqrt{\hbar^2 \omega^2 - m_0^2 c^4} d\omega = 1. \quad (5.49)$$

Не повторяя предыдущих выкладок, несложно показать, что

$$q(t) = q_0,$$

поскольку для каждой из спектральных компонент волнового пакета имеем

$$R(\omega) + T(\omega) = 1.$$

Как мы видели, по крайней мере, на примере прямоугольной потенциальной ступеньки и потенциальной ступеньки (5.32) это соотношение выполняется тождественно.

Замечания и выводы

Проведенный выше анализ позволяет сделать следующие выводы.

Во-первых, при анализе задач рассеяния задание состояния падающей частицы в виде волнового пакета приводит к принципиально важным следствиям, которые не поддаются интерпретации в рамках традиционной модели плоских волн. Использование волновых пакетов при расчете квантово-механических средних физически наблюдаемых величин для состояний сплошного спектра позволяет избежать расхождений, неизбежно возникающих при использовании модели плоских

волн, и, как результат, получать строгие математические соотношения между характеристиками падающей и рассеянных частиц.

Во-вторых (и это, безусловно, более принципиально), задание состояния частицы в виде волнового пакета приводит к появлению новой характеристики состояния материального поля — групповой скорости $v_g = (\partial k / \partial \omega)^{-1}$, которая имеет наглядную физическую интерпретацию. Как видно из формул (5.44) и (5.47), эта характеристика материального поля является неизбежным атрибутом математической формулировки закона сохранения заряда, выражаемого равенствами (5.46) и (5.48).

В-третьих, как следует из вышеприведенных формул, последовательная теория зеркальных частиц полностью базируется на использовании понятия отрицательной вероятности, что придает ей форму строгой математической теории.

5.3. Движение частицы в кулоновском поле

Задача о движении заряженной частицы в кулоновском поле играет принципиальную роль в квантовой механике, поскольку эта модель является базовой моделью атома (если быть более точным, моделью атома с бесконечно тяжелым ядром). Как мы отмечали выше, именно объяснение дискретной структуры спектров излучения атомов послужило основным стимулом для развития квантовой механики. В свою очередь, соответствие рассчитываемых энергетических спектров состояния частицы в кулоновском поле экспериментально наблюдаемым в то время сериям радиационных переходов в водородоподобных атомах (серия Лаймана, Пашена и т. д. [42]) дало неоспоримые доказательства в пользу справедливости основных положений развиваемого квантово-механического подхода. Объяснение лембовского сдвига уровней в атоме водорода [44] послужило позже экспериментальной базой для развития теории вторичного квантования, т. е. теории квантованных полей. Одним из основных и наиболее эффективных методов квантовой теории поля является инвариантная теория возмущений, позволяющая представлять взаимодействие частиц друг с другом и с электромагнитным полем в виде суммы элементарных процессов. Следует тем не менее отметить, что область применимости этих методов принципиально ограничивается малостью параметра $Z\alpha$. С одной стороны, это ограничение можно было бы считать непринципиальным, поскольку не существует стабильных связанных состояний систем заряженных частиц с $Z > \alpha^{-1}$. С другой стороны, вряд ли следует ожидать, что последовательное объяснение нестабильности состояний в целом нейтральных многочастичных систем заряженных частиц с зарядом ядра $Z \geq \alpha^{-1}$ может быть получено в рамках методов, основанных на теории возмущений по параметру $Z\alpha$. Следовательно, развитие непerturbативных методов расчета имеет принципиальное значение. К более подробному обсуждению этих проблем мы обратимся

в следующем разделе, а настоящий раздел будет посвящен расчету стандартного спектра состояний частицы в кулоновском поле.

5.3.1. Энергетический спектр. Рассмотрим задачу о движении частицы в кулоновском поле:

$$U(r) = e\varphi(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (5.50)$$

Задача о движении частицы с нулевым спином в кулоновском поле соответствует, например, задаче о движении отрицательного пиона в поле атомных ядер, спин которых равен нулю. Связанное состояние пиона в поле атомного ядра образует π -мезонный атом, поэтому Z в (5.50) есть заряд ядра.

Уравнение (4.3) принимает в этом случае вид

$$\left[\Delta - \frac{m_0^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{2EZe^2}{\hbar^2 c^2} \frac{1}{r} + \frac{Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2} \frac{1}{r^2} \right] \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (5.51)$$

Учитывая центральную симметрию задачи, решение последнего уравнения можно искать в виде разложения по сферическим функциям:

$$\psi(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (5.52)$$

тогда для радиальной волновой функции получаем следующее уравнение:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1) - Z^2 \alpha^2}{r^2} + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} - \kappa^2 \right] R_l(r) = 0, \quad (5.53)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры и

$$\kappa = \frac{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}}{\hbar c}.$$

Граничные условия краевой задачи (5.53) для радиальной волновой функции задаются в точках $r = 0$ и $r = \infty$ и состоят в задании определенной асимптотической формы волновой функции. Для связанных состояний частицы граничные условия на бесконечности сводятся к обращению волновой функции в нуль. Поскольку кулоновский потенциал является сингулярным, то волновая функция может быть расходящейся в нуле. Однако расходимость должна быть такой, чтобы нормировочный интеграл $\int \rho(\mathbf{r}) dV$ имел конечные значения. Этим условием определяются ограничения на возможный вид асимптотической формы волновой функции в нуле.

Величина кинетической энергии движения частицы (без учета массы покоя), находящейся в связанном состоянии, лежит в пределах $U_{\min} < E - m_0 c^2 \leq U_{\max}$. Для потенциала (5.50) $U_{\max} = U(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0$, а $U_{\min} = -\infty$, поэтому собственные значения энергии связанных состояний ограничены лишь условием $|E_n| \leq m_0 c^2$. Отметим, что поскольку кулоновский потенциал (5.50) является сингулярным, то нет априорных оснований полагать, что все собственные значения, отвеча-

ющие связанным состояниям частицы, будут положительно частотными.

Общее решение уравнения (5.53) выражается через вырожденные гипергеометрические функции $F(a, b, z)$ и имеет вид

$$R(r) = C_1 r^s \exp(-\kappa r) F\left(s + 1 - \frac{EZ\alpha}{\kappa\hbar c}, 2(s + 1), 2\kappa r\right) + C_2 r^{-(s+1)} \exp(-\kappa r) F\left(-s - \frac{EZ\alpha}{\kappa\hbar c}, -2s, 2\kappa r\right), \quad (5.54)$$

где

$$s = s_l = \sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2\alpha^2} - 1/2. \quad (5.55)$$

Вырожденная гипергеометрическая функция при $z \rightarrow \infty$ имеет следующий асимптотический вид:

$$F(a, b, z)|_{z \rightarrow \infty} = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} z^{-a} \exp(i\pi a) + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \exp(z) z^{a-b} + \dots$$

Следовательно, волновая функция (5.54) стремится к нулю на бесконечности ($r \rightarrow \infty$) только при выполнении условий

$$s + 1 - \frac{EZ\alpha}{\kappa\hbar c} = -n_1, \quad (5.56a)$$

$$s + \frac{EZ\alpha}{\kappa\hbar c} = n_2, \quad (5.56b)$$

где n_1 и n_2 — целые неотрицательные числа.

5.3.2. Нормированные волновые функции. В рамках нерелятивистских теорий полагается, что волновая функция связанных состояний частицы не должна иметь расходимостей, т. е. должна быть конечной во всех точках пространства. Из (5.54) и (5.55) видно, что этому условию может удовлетворять лишь первое из решений (5.54):

$$R^{(1)}(r) = C_1 r^s \exp(-\kappa r) F\left(s + 1 - \frac{EZ\alpha}{\kappa\hbar c}, 2(s + 1), 2\kappa r\right).$$

Поэтому остановимся сначала на нем.

Условие (5.56a) приводит к следующему спектру собственных значений:

$$E_{nl}^{(1)} = \frac{m_0 c^2 (n + s_l + 1)}{\sqrt{(n + s_l + 1)^2 + Z^2\alpha^2}}, \quad (5.57)$$

где $n = n_1$. При выполнении условия (5.56a) вырожденная гипергеометрическая функция становится конечным степенным рядом и выражается через полиномы Лагерра:

$$R_{nl}^{(1)}(r) = C_1 L_n^{(2s+1)}(2\kappa r) \exp(-\kappa r) r^s. \quad (5.58)$$

Учитывая выражение (5.55), несложно видеть, что функция $R_{nl}^{(1)}(r)$ является сингулярной лишь при $l = 0$. Однако расходимость волновой функции при $r = 0$ не является основанием для отбрасывания

соответствующих решений. Во-первых, кулоновский потенциал является расходящимся в нуле. Во-вторых, критерием отбора решений является возможность нормировки волновых функций. Все нормируемые волновые функции не нарушают вероятностной интерпретации квантово-механических уравнений, которая базируется на выполнении уравнения непрерывности. Действительно, наряду с объемной плотностью заряда $\rho(\mathbf{r})$ удобно ввести радиальную плотность распределения заряда dq/dr , определяемую следующим образом:

$$q = \int \rho(\mathbf{r}) dV = \int_0^{\infty} \frac{dq}{dr} dr,$$

откуда

$$\frac{dq}{dr} = \rho(r)r^2 = r^2 \int \rho(\mathbf{r}) d\Omega. \quad (5.59)$$

Для радиальной плотности распределения заряда получаем

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dr} &= \frac{E_{nl} - U(r)}{m_0 c^2} \left(R_{nl}^{(1)}(r) \right)^2 r^2 = \\ &= C_1^2 \frac{E_{nl} - U(r)}{m_0 c^2} \left(L_n^{(2s+1)}(2\kappa^{(1)}r) \right)^2 \exp(-2\kappa^{(1)}r) (2\kappa^{(1)}r)^{2(s+1)}. \end{aligned}$$

Из (5.55) следует, что радиальная плотность распределения заряда не является расходящейся даже для состояний с $l = 0$.

Выше мы показали (см. (4.21)), что собственные волновые функции краевой задачи (5.51), отвечающие различным собственным значениям, являются ортогональными друг другу. В свою очередь угловые части волновых функций (5.52) являются ортонормированными:

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

поэтому остановимся на условии нормировки радиальных волновых функций (5.58)

$$\frac{1}{m_0 c^2} \int R_{nl}^{(1)}(r) \left(E_{nl}^{(1)} + \frac{Ze^2}{r} \right) R_{nl}^{(1)}(r) r^2 dr = \pm 1.$$

Подставляя в последнее выражение волновые функции (5.58), получаем

$$\begin{aligned} C_1^2 \frac{(2\kappa)^{-\nu-2}}{m_0 c^2} \left[E_n \int_0^{\infty} \left(L_n^{(\nu)}(x) \right)^2 \exp(-x) x^{\nu+1} dx + \right. \\ \left. + 2Z\alpha \sqrt{m_0^2 c^4 - E_n^2} \int_0^{\infty} \left(L_n^{(\nu)}(x) \right)^2 \exp(-x) x^{\nu} dx \right] = \pm 1, \quad (5.60) \end{aligned}$$

где $\nu = 2s + 1$. После интегрирования выражение (5.60) принимает вид

$$C_1^2 \frac{(2\kappa)^{-\nu-2}}{m_0 c^2} \left[(2n + \nu + 1) E_n + 2Z\alpha \sqrt{m_0^2 c^4 - E_n^2} \right] \frac{\Gamma(n + \nu + 1)}{n!} = \pm 1. \quad (5.61)$$

Как видно, собственные значения (5.57) являются всегда положительными, поэтому в правой части (5.61) мы можем оставить лишь знак плюс и окончательно для нормированных волновых функций (5.58) получаем

$$R_{nl}^{(1)}(r) = 2\kappa^{3/2} \sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n + 2s + 2)}} \frac{1}{\sqrt{(n + s + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}} \times \\ \times L_n^{(2s+1)}(2\kappa r) \exp(-\kappa r) (2\kappa r)^s. \quad (5.62)$$

Учитывая определение параметра s (см. (5.55)), мы видим, что нормировочная константа волновых функций (5.62) является положительной и конечной при произвольных значениях квантовых чисел n и l .

5.3.3. Стандартный базис состояний частицы в кулоновском поле. При $Z\alpha \ll 1$ для энергии состояний с волновыми функциями (5.62) получаем следующее разложение в ряд по степеням параметра $Z\alpha$:

$$E_{nl}^{(1)} = m_0 c^2 \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2(n + l + 1)^2} - \frac{Z^4 \alpha^4}{2(n + l + 1)^4} \left(\frac{n + 1/2}{l + 1/2} + \frac{1}{4} \right) + \dots \right]. \quad (5.63)$$

Слагаемое, пропорциональное α^2 , совпадает с выражением для энергии уровней водородоподобного атома, следующим из решения нерелятивистского уравнения Шредингера. Слагаемые более высокого порядка по постоянной тонкой структуре приводят к релятивистским поправкам. Как видно из структуры уравнения (5.51), принципиальное отличие этого уравнения от нерелятивистского уравнения Шредингера состоит в наличии слагаемого, пропорционального $U^2(r)$. Именно это слагаемое приводит к появлению релятивистских поправок. Действительно, воспользуемся следующим тождественным преобразованием:

$$s_l = l - \delta_l = l - \frac{Z^2 \alpha^2}{\sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} + l + 1/2}.$$

Следовательно, при $Z\alpha \ll 1$ получаем $\delta_l \ll 1$ и параметр s_l принимает вид

$$s_l \approx l.$$

В указанном приближении радиальные волновые функции (5.62) совпадают с собственными волновыми функциями нерелятивистского уравнения Шредингера для частицы, движущейся в кулоновском поле.

Качественное отличие спектра (5.57) от спектра нерелятивистской задачи состоит в том, что в спектре (5.57) появляется тонкая струк-

тура, проявляющаяся в том, что уровни, отвечающие одному и тому же значению главного квантового числа $n_p = n + l + 1$, но различным значениям углового момента, расщепляются. Например, уровни, характеризующиеся радиальным квантовым числом n и угловым моментом l , сдвигаются относительно уровней с $n' = n - 1$ и $l' = l + 1$ на величину

$$E_{nl} - E_{n'l'} = \frac{m_0 c^2 (n_p - \delta_l)}{\sqrt{(n_p - \delta_l)^2 + Z^2 \alpha^2}} - \frac{m_0 c^2 (n_p - \delta_{l+1})}{\sqrt{(n_p - \delta_{l+1})^2 + Z^2 \alpha^2}}.$$

Как видно из (5.63), сдвиг пропорционален $m_0 c^2 Z^4 \alpha^4$ и содержит слагаемые более высокого порядка. В частности, расщепляются $2s$ - и $2p$ -уровни, имеющие в нерелятивистском случае одинаковую энергию.

Таким образом, как следует из разложения (5.63), первое из решений (5.54) уравнения для радиальной волновой функции (5.53) приводит к *стандартному базису состояний частицы* в притягивающем кулоновском поле, который при $Z\alpha \ll 1$ близок к базису состояний нерелятивистской частицы, движущейся в кулоновском поле. Асимптотическое поведение волновых функций и собственных значений этого базиса показывает, что стандартный базис состояний относится к положительно частотной зоне состояний частицы.

Как мы отмечали выше, несмотря на сингулярность волновых функций (5.62) с $l = 0$, распределение плотности заряда особенностей не имеет, поэтому характерный пространственный размер орбит частиц, находящихся в состояниях стандартного базиса, определяется экспоненциальным спаданием волновых функций

$$\kappa_{nl} = \frac{Z}{a_0} \frac{1}{\sqrt{(n + s_l + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}},$$

где

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}. \quad (5.64)$$

В нерелятивистской теории атома величина $a_0 = \hbar^2 / m_e e^2$, где m_e — масса электрона, называется радиусом Бора и служит единицей длины атомной системы единиц. Как видно, радиус орбит низколежащих состояний стандартного базиса определяется величиной

$$a_Z = \frac{a_0}{Z}. \quad (5.65)$$

Характерная величина энергии связи частицы определяется потенциалом ионизации, т. е. энергией основного состояния, характеризующегося квантовыми числами ($n_1 = 0, l_1 = 0$). Для состояний стандартного базиса потенциал ионизации определяется выражением

$$I_0 = \frac{1}{2} m_0 c^2 Z^2 \alpha^2 = \frac{m_0 e^4}{2 \hbar^2} Z^2. \quad (5.66)$$

В теории атомных спектров величина I_0 , соответствующая $Z = 1$ и массе m_0 , равной массе электрона, называется энергией Ридберга и служит единицей измерения энергии в атомной системе единиц. Для мезонов I_0 больше энергии Ридберга в отношении массы мезона к массе электрона.

5.3.4. Эффективный угловой момент. Если сопоставить формулы (5.53) и (5.55), то несложно видеть, что уравнение (5.53) можно записать в следующем тождественном виде:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{s(s+1)}{r^2} + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} - \kappa^2 \right] R(r) = 0. \quad (5.67)$$

Откуда следует, что в рамках релятивистских теорий параметр s играет роль эффективного углового момента. Действительно, это становится очевидным, если сопоставить формулы (5.57) и (5.58) с формулами нерелятивистской теории. Более того, воспользуемся следующим тождественным преобразованием:

$$s_l = l - \delta_l = l - \frac{Z^2 \alpha^2}{\sqrt{(l+1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} + l + 1/2}. \quad (5.68)$$

Таким образом, при $Z\alpha \ll 1$ параметр s_l принимает вид

$$s_l \approx l.$$

Отметим, что в указанном случае ($Z\alpha \ll 1$), волновые функции (5.62) совпадают с собственными волновыми функциями нерелятивистского уравнения Шредингера для частицы, движущейся в кулоновском поле.

Возникновение параметра s , не являющегося целым числом, в уравнении (5.67) обусловлено совпадением пространственных зависимостей слагаемых $\frac{1}{r^2}\psi$ и $U^2\psi$ уравнения (5.51). Вместе с тем уравнение (5.67) наглядно демонстрирует общие и отличительные черты релятивистских и нерелятивистских уравнений и влияние релятивистского слагаемого $U^2(r)$ на структуру спектра положительно частотных состояний.

Несложно видеть, что имеет место структурная схожесть параметра s , определяемого соотношением (5.55), и параметра s , определяемого соотношением (5.36) и играющего принципиальную роль в одномерных задачах рассеяния. Структурная схожесть указанных параметров имеет единую основу и связана с наличием в уравнении (5.33) слагаемого, пропорционального $U^2(z)$. Действительно, как следует из вида уравнения (5.34), в нем появляется дополнительное по сравнению с нерелятивистскими теориями слагаемое пропорциональное $\left(\frac{U_0}{2\hbar c\beta}\right)^2 = s(s+1)$.

Это слагаемое существенно влияет на степень связи состояний частицы и зеркальной частицы.

5.4. Базис волновых функций отрицательно частотной зоны состояний частицы в кулоновском поле (связанные состояния зеркальных частиц)

Результаты, полученные выше, ярко демонстрируют, что систематика состояний, основанная на модели свободной частицы, не позволяет увидеть всего многообразия физически различных состояний материального поля. Специфика материальных волновых уравнений второго порядка по временной производной состоит в том, что общее решение уравнений является суперпозицией положительно и отрицательно частотных решений. Анализ одномерных задач рассеяния убедительно показал, что отрицательно частотные решения соответствуют новым состояниям материального поля — зеркальной материи. Отличительная черта этих новых состояний материального поля состоит в том, что взаимодействие частицы и зеркальной частицы происходит лишь в ультрарелятивистских полях с напряженностью электрического поля больше или порядка

$$E_{mir} \approx 2m_0c^2/q_0\lambda_C = 2m_0^2c^3/q_0\hbar, \quad (5.69)$$

где λ_C — комптоновская длина волны.

Анализ задачи о спектре собственных состояний частицы в кулоновском поле дает дополнительную наглядную физическую интерпретацию положительно и отрицательно частотным состояниям материального поля. В настоящем разделе мы покажем, что при движении в кулоновском поле связанным состояниям частицы могут отвечать состояния не только положительно, но и отрицательно частотного спектра [40]. При анализе задач рассеяния, используя представление о волновых пакетах, мы связали состояния отрицательно частотного спектра с состояниями зеркальных частиц. Обсуждение связанных состояний отрицательно частотного спектра в кулоновском поле вновь приводит нас к терминологической проблеме определения состояний материального поля, отвечающих им. С одной стороны, вполне естественным выглядит термин античастица. С другой стороны, учитывая результаты вышеприведенного рассмотрения, не менее естественным выглядит термин зеркальная частица. Эти терминологические трудности связаны с расширением пространства состояний материальных полей, описываемых волновыми уравнениями со второй производной по времени.

Сравним нерелятивистскую и релятивистскую краевые задачи о движении частицы в притягивающем и отталкивающем кулоновских

полей. Соответствующие волновые уравнения для указанных задач имеют следующий вид:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta \pm \frac{Ze^2}{r}\right)\psi = E\psi,$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta \pm \frac{E}{m_0c^2}\frac{Ze^2}{r} - \frac{1}{2m_0c^2}\frac{Z^2e^4}{r^2}\right)\psi = \frac{E^2 - m_0^2c^4}{2m_0c^2}\psi,$$

где знаки плюс и минус отвечают соответственно отталкивающему и притягивающему кулоновским полям. Несложно видеть, что в релятивистском случае в качестве потенциальной энергии выступает функция

$$U^{(\pm)}(r) = \pm \frac{E}{m_0c^2}\frac{Ze^2}{r} - \frac{1}{2m_0c^2}\frac{Z^2e^4}{r^2}. \quad (5.70)$$

В то время как в нерелятивистском случае потенциальная энергия отрицательна лишь для притягивающего взаимодействия, потенциальная энергия (5.70) становится отрицательной и в отталкивающем кулоновском поле на расстояниях $r \leq r_0(E)$, где

$$r_0(E) = \frac{Ze^2}{2E}. \quad (5.71)$$

Вид потенциальной энергии (5.70) для случая $E \approx m_0c^2$ показан на рис. 5.8 для притягивающего (а) и отталкивающего (б) кулоновских потенциалов. Отметим, что при $E = m_0c^2$ величина r_0 равна половине классического радиуса заряженной частицы $r_m = e^2/m_0c^2$. Понятно, что величина $r_0(E)$ определяет характерный радиус орбит связанных состояний античастицы (зеркальной частицы). Учитывая формулы (5.64) и (5.65), величину $r_0(E)$ можно связать с радиусом орбит связанных положительно частотных состояний частицы a_Z . Эта связь имеет вид

$$r_0(E) = a_Z \frac{Z^2\alpha^2 m_0c^2}{2E}.$$

Таким образом, мы видим, что и частица, и античастица (зеркальная частица) могут иметь спектр связанных состояний в одном и том же кулоновском поле. Отметим, что при $Z\alpha \rightarrow 1$ величина r_0 стремится к a_Z , следовательно, радиусы орбит связанных состояний частицы и античастицы начинают в этом случае совпадать. Как мы увидим позже, именно это обстоятельство является основной причиной нестабильности атомных систем с $Z\alpha \geq 1$.

5.4.1. Нормированная волновая функция. Обратимся ко второму линейно независимому решению (5.54). Оно имеет вид

$$R^{(2)}(r) = C_2 r^{-(s+1)} \exp(-\kappa r) F\left(-s - \frac{EZ\alpha}{\kappa\hbar c}, -2s, 2\kappa r\right).$$

Условие (5.56б) определяет спектр собственных значений связанных состояний частицы, который имеет вид

$$E_{nl}^{(2)} = \pm \frac{m_0c^2(n-s)}{\sqrt{(n-s)^2 + Z^2\alpha^2}}. \quad (5.72)$$

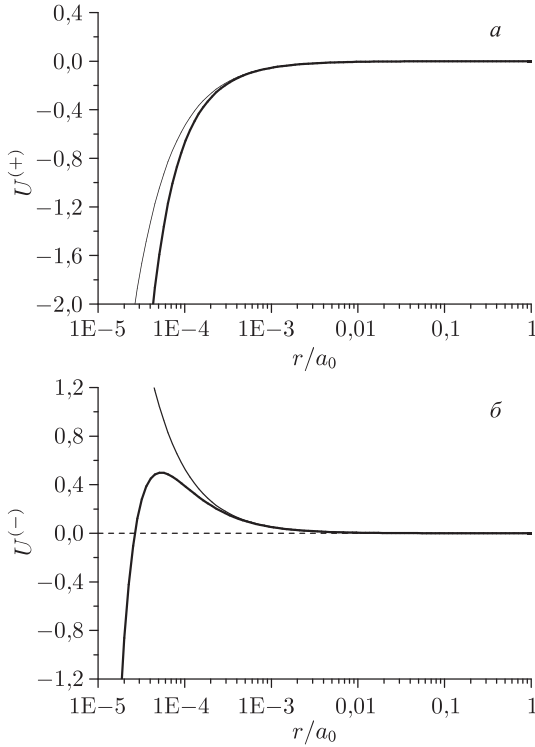


Рис. 5.8. Вид эффективной потенциальной энергии (5.70) в притягивающем (а) и отталкивающем (б) кулоновском поле. Тонкой линией показан кулоновский потенциал

Радиальная волновая функция при выполнении условия (5.56б) принимает вид

$$R_{nl}^{(2)}(r) = C_2 L_n^{(-2s-1)}(2\kappa r) \exp(-\kappa r) r^{-(s+1)}. \quad (5.73)$$

Общее решение (5.54) не предполагает определенного знака Z в уравнении (5.53). Спектр собственных значений (5.50) также является двузначным. При выборе знака в (5.57) мы руководствовались тем соображением, что для $Z > 0$ соотношение (5.56а) выполняется лишь при $E > 0$. В отличие от (5.56а), соотношение (5.56б) может выполняться при произвольном знаке Z . Второе отличие спектра собственных значений (5.72) от спектра (5.57) состоит в том, что даже при знаке плюс в (5.72) собственные значения могут быть как положительными (при $n > s$), так и отрицательными (при $n < s$). Сложность идентификации состояний, отвечающих спектру (5.72), состоит также в том, что, как это следует из общего анализа, приведенного в гл. 4, знак собственного значения не определяет его принадлежности к зоне положительно или отрицательно частотных решений. Мы убедились в этом на примере

одномерных задач рассеяния. Поэтому выбор знака в (5.72) требует дополнительного анализа.

Как следует из (5.73), волновые функции $R_{nl}^{(2)}(r)$ сингулярны в нуле, поэтому, с учетом предыдущего обсуждения и иллюстраций, представленных на рис. 5.8, становится ясно, что спектр состояний (5.72)–(5.73) отвечает спектру связанных состояний частицы в отталкивающем потенциале или спектру связанных состояний зарядово-сопряженной частицы в отталкивающем для нее потенциале. Согласно обсуждавшемуся выше алгоритму, именно положительно частотный спектр состояний зарядово-сопряженной частицы в отталкивающем потенциале с точностью до знака определяет спектр отрицательно частотных состояний частицы в притягивающем кулоновском поле.

Отталкивающему кулоновскому полю отвечает значение $Z < 0$ в (5.53). Следовательно, положительно частотному решению для зарядово-сопряженной частицы отвечает знак минус в (5.72). Имея в виду, что собственные значения отрицательно частотных решений уравнения для частицы отличаются по знаку от собственных значений задачи для зарядово-сопряженной частицы, мы приходим к выводу, что знак плюс в (5.72) отвечает собственным значениям отрицательно частотной зоны состояний для частицы в притягивающем кулоновском поле.

Обратимся теперь к обсуждению радиальных волновых функций (5.73). Учитывая определение параметра s , задаваемого выражением (5.55), несложно видеть, что в то время как волновая функция $R_{nl}^{(1)}(r)$ является сингулярной лишь при $l = 0$, волновая функция $R_{nl}^{(2)}(r)$ является сингулярной в более широкой области изменения квантовых чисел n и l . Нормировочный интеграл для волновой функции (5.73) снова имеет вид (5.60), где параметр ν , однако, имеет теперь вид: $\nu = -2s - 1$. Поскольку полиномы Лагерра являются многочленами конечной степени:

$$L_n^{(\nu)}(x) = \sum_{m=1}^n (-1)^m \binom{n+\nu}{n-m} \frac{1}{m!} x^m,$$

то несложно видеть, что нормировочный интеграл сводится к сумме интегралов следующего вида:

$$I(a) = \int_0^{\infty} \exp(-x) x^a dx.$$

Интеграл $I(a)$ является интегралом Эйлера и определяет гамма-функцию: $I(a) = \Gamma(a + 1)$. Гамма-функция является однозначной аналитической функцией на всей комплексной плоскости $a = a' + ia''$, за исключением точек $a = -n$ (где n — целые неотрицательные числа), в которых она имеет простые полюсы. Проводя интегрирование в (5.60) с волновыми функциями (5.73), получаем

$$C^2 \frac{2(2\kappa)^{2s-1}}{m_0 c^2} \left[(n-s) E_{nl} + Z\alpha \sqrt{m_0^2 c^4 - E_{nl}^2} \right] \frac{\Gamma(n-2s)}{n!} = \pm 1.$$

Как видно, норма волновой функции (5.73) может быть как положительной, так и отрицательной в зависимости от величины параметра $n - 2s$. Подставляя (5.72) в (5.61), для нормированной волновой функции (5.73) получаем

$$R_{nl}^{(2)}(r) = 2\kappa^{3/2} \sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n-2s)} \frac{1}{\sqrt{(n-s)^2 + Z^2\alpha^2}}} L_n^{(-2s-1)}(2\kappa r) \times \\ \times \exp(-\kappa r)(2\kappa r)^{-(s+1)}. \quad (5.74)$$

Несложно видеть, что константа нормировки волновых функций (5.74) является конечной, если $n - 2s$ не является нулем или целым отрицательным числом ($n - 2s \neq 0, -1, -2, \dots$). Следовательно, параметр s не должен быть целым или полуцелым числом. Как мы показали выше (см. уравнение (5.67)), параметр s играет роль эффективного углового момента и релятивистское слагаемое уравнения (5.51), пропорциональное $q_0^2 \varphi^2(\mathbf{r})$, приводит к тому, что параметр s становится в общем случае отличным от целого числа.

Однако поскольку отличие параметра s от l согласно (5.68) зависит от величины $Z\alpha$, то определим возможности обращения s в целое или полуцелое число при изменении заряда ядра Z . Решение уравнения

$$s(Z) = p$$

имеет вид

$$Z_i \alpha = \sqrt{(l-p)(l+p+1)}.$$

При $p = 0$ расходящимися становятся волновые функции (5.74), отвечающие значению радиального квантового числа $n = 0$. Для Z_i получаем

$$Z_i \alpha = \sqrt{l(l+1)}. \quad (5.75a)$$

При $p = 1/2$ расходящимися становятся волновые функции, отвечающие состояниям с $n = 0$ и $n = 1$. Для Z_i получаем

$$Z_i \alpha = \sqrt{(l+1/2)^2 - 1}. \quad (5.75b)$$

Особым является также и значение $p = -1/2$, которому соответствует решение

$$Z_i \alpha = l + 1/2, \quad (5.75в)$$

поскольку при $Z\alpha > (l+1/2)$ параметр s становится комплексным, а следовательно, комплексными становятся и собственные значения (5.57) и (5.72).

Введем квантовые числа (n_1, l_1) для определения состояний спектра (5.57) и квантовые числа (n_2, l_2) для определения состояний спектра (5.72). На рис. 5.9 представлен интегральный спектр собственных значений частицы в притягивающем кулоновском поле как функция заряда ядра $Z\alpha$, этот спектр включает как собственные

значения (5.57), так и отвечающие знаку плюс собственные значения (5.72). Вертикальными штриховыми линиями показаны значения $Z_i\alpha$, которые определяются формулами (5.75а–в). Несложно видеть, что при указанных значениях происходит слияние или пересечение уровней. Следует, однако, отметить, что значения Z_i , определяемые формулами (5.75а–в) не являются целочисленными, например $\sqrt{2}/\alpha = 193,79816939$ и $1/2\alpha = 68,51799988$. Поскольку заряд ядра Z является дискретным целым числом, то пересечения уровней в реальных мезоатомах не происходит.

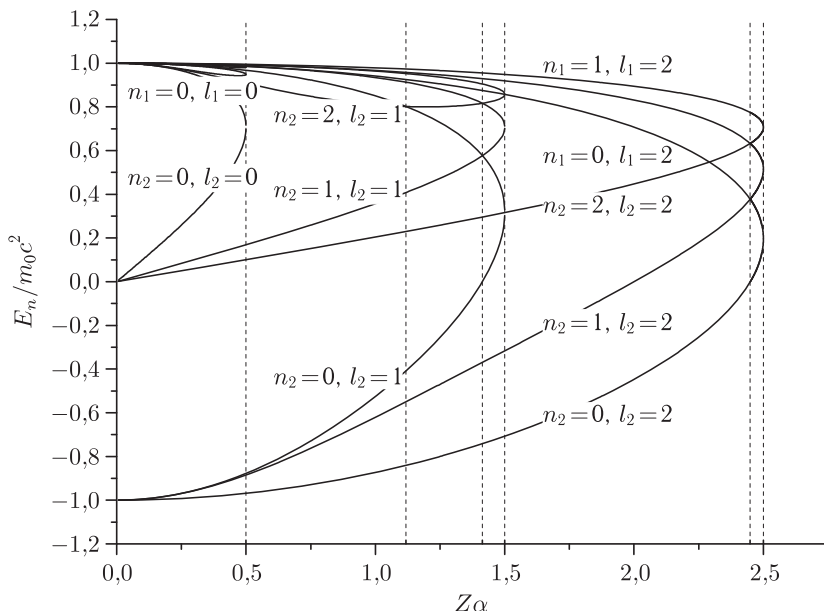


Рис. 5.9. Интегральный спектр собственных значений энергии связанных состояний частицы и зеркальной частицы в кулоновском поле как функция заряда ядра Z . Вертикальными штриховыми линиями показаны значения $Z_i\alpha$, которые определяются формулами (5.75а–в)

Замечания и выводы

Соотношения (5.75а–в) играют принципиально важную роль, поскольку позволяют сделать важные выводы.

Во-первых, расходимость нормы волновых функций (5.74) однозначно связана с совпадением собственных значений (5.57) и (5.72), отвечающих положительно и отрицательно частотным зонам состояний.

Во-вторых, целая часть значений Z_i определяет заряды ядер, для которых величины собственных значений (5.57) и (5.72) становятся наиболее близки друг к другу. Волновые функции состояний отрицательно частотной зоны сингулярны в нуле. Как мы видели выше,

в указанных состояниях частица находится от центра ядра на расстояниях порядка ее классического радиуса. Следовательно, переходы частицы на уровни отрицательно частотного спектра воспринимаются наблюдателем как процессы, приводящие к изменению состояния ядра водородоподобного атома или иона. Несколько забегаая вперед, отметим, что при совпадении величины собственных значений становятся совпадающими и радиусы пространственной локализации частиц, находящихся в состояниях положительно и отрицательно частотных зон, что оказывает деструктивное воздействие на стабильность атомоподобных систем.

В-третьих, как мы отмечали в предыдущей главе, в рамках теории, допускающей отрицательные значения вероятности, энергетический спектр состояний материального поля может не совпадать со спектром собственных значений, поскольку, например, энергия материального поля в состоянии, отвечающем положительному собственному значению и отрицательной норме волновой функции, имеет знак, противоположный знаку собственного значения. Это обстоятельство, безусловно, оказывает существенное влияние на физическую интерпретацию процессов, происходящих в атомных системах.

5.4.2. Подзона состояний отрицательно частотной зоны с положительными собственными значениями. Базируясь на выбранном знаке состояний отрицательно частотной зоны состояний частицы в притягивающем кулоновском поле, проведем сравнительный анализ собственных значений положительно и отрицательно частотных зон.

Приведенное выше обсуждение показало, что параметр s_l , определяемый соотношением (5.55), является одним из принципиально важных (управляющих) параметров задачи. Как мы уже отмечали, соотношение (5.55) можно переписать в следующем тождественном виде:

$$s_l = l - \delta_l = l - \frac{Z^2 \alpha^2}{\sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} + l + 1/2}.$$

При $Z\alpha \ll 1$ получаем $\delta_l \ll 1$, поэтому в указанном пределе $s_l \approx l$. Следовательно, обращаясь к формуле (5.72):

$$E_{n_2 l_2}^{(2)} = \frac{m_0 c^2 (n_2 - l_2 - \delta_l)}{\sqrt{(n_2 - l_2 - \delta_l)^2 + Z^2 \alpha^2}} \approx \frac{m_0 c^2 (n_2 - l_2)}{\sqrt{(n_2 - l_2)^2 + Z^2 \alpha^2}},$$

несложно видеть, что спектр: (5.72) разбивается в этом случае на три группы состояний: а) $E^{(2)} \approx m_0 c^2$ при $n_2 > l_2$, б) $E^{(2)} \approx 0$ при $n_2 = l_2$, в) $E^{(2)} \approx -m_0 c^2$ при $n_2 < l_2$. Следует сразу отметить, что при $Z\alpha \ll 1$ наглядно прослеживается общее свойство, состоящее в зеркальной симметрии между собственными значениями спектра (5.57) и собственными значениями указанных трех групп спектра (5.72). Действительно, собственные значения (5.57) растут с ростом l_1 , а собственные значения (5.72) уменьшаются с ростом l_2 .

Остановимся на первой группе состояний, для которой $E_{nl}^{(2)} \approx m_0 c^2$. Разложение собственных значений (5.72) по степеням $Z\alpha$ имеет в этом случае вид

$$E_{n_2 l_2}^{(2)} = m_0 c^2 \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2(n_2 - l_2)^2} + \frac{Z^4 \alpha^4}{2(n_2 - l_2)^4} \left(\frac{n_2 + 1/2}{l_2 + 1/2} - \frac{1}{4} \right) + \dots \right]. \quad (5.76)$$

Несложно видеть, что с точностью до членов, пропорциональных α^2 , собственные значения состояний с $n_1 + l_1 + 1 = n_2 - l_2$ одинаковы и совпадают с энергетическим спектром, следующим из решения нерелятивистского уравнения Шредингера. Учет последующих членов приводит к тому, что собственные значения состояний, описываемых волновой функцией $R^{(1)}$, уменьшаются, а состояний, описываемых волновой функцией $R^{(2)}$, увеличиваются. Отметим, что спектры (5.63) и (5.76) зеркально симметричны. Действительно, формальная замена $l_2 \rightarrow -(l_1 + 1)$ приводит спектр (5.76) к виду (5.63), что, бесспорно, указывает на то, что спектр собственных значений (5.72) является спектром состояний античастицы, свободными состояниями которой являются состояния с энергией $E \leq -m_0 c^2$. Как видно, собственные значения рассматриваемой группы состояний спектра (5.72) лежат в области $m_0 c^2 - I_0 \leq E_{nl}^{(2)} \leq m_0 c^2$.

Как мы отмечали выше, радиус пространственного распределения плотности заряда состояний спектра (5.57) определяется экспоненциальным спаданием волновых функций (5.62) и задается величиной a_Z , определяемой соотношением (5.65). Сравнивая величину κ^{-1} для состояний спектра (5.57) и состояний группы $E^{(2)} \approx m_0 c^2$ спектра (5.72):

$$\left(\kappa_{n_1 l_1}^{(1)} \right)^{-1} \approx a_Z (n_1 + l_1 + 1), \quad \left(\kappa_{n_2 l_2}^{(2)} \right)^{-1} \approx a_Z (n_2 - l_2),$$

мы видим, что эти величины оказываются близки. Однако волновые функции (5.74) являются расходящимися в нуле, поэтому параметр κ^{-1} не определяет в этом случае характерного пространственного размера орбит.

Рисунки 5.10, а, б показывают в сравнении собственные значения (5.57) и собственные значения спектра (5.72) для случая $n_2 > l_2$. Несложно видеть, что вблизи положительно частотных состояний, определяемых квантовыми числами $(n_1, l_1 = 0)$, возникает серия отрицательно частотных состояний собственных значений, характеризуемая квантовыми числами $(n_2 > n_1, l_2 = n_2 - (n_1 + 1))$. Предельные собственные значения этой серии, отвечающие состояниям с $n_2 \rightarrow \infty$, показаны на рисунке пунктирной линией. Несложно видеть, что энергия связи $\Delta E_{nl}^{(i)} = m_0 c^2 - E_{nl}^{(i)}$ в состояниях отрицательно частотного спектра $\Delta E_{nl}^{(2)}$ меньше, чем энергия связи основного уровня положительно частотного спектра $\Delta E_{n=0, l=0}^{(1)}$, поэтому энергетически более выгодным является состояние, когда частица находится в состоянии

положительно частотного спектра, т. е. атомоподобная система, когда частица находится в атомной оболочке, а не внутри ядра, является более устойчивой. Это, однако, имеет место лишь в той области значений заряда ядра, где собственные значения $E_{nl}^{(i)}$ различаются. По мере роста заряда ядра атома, как видно из рис.5.9, собственные значения $E_{nl}^{(1)}$ и $E_{n'l'}^{(2)}$ начинают сближаться, это приводит к нестабильности атомоподобных систем.

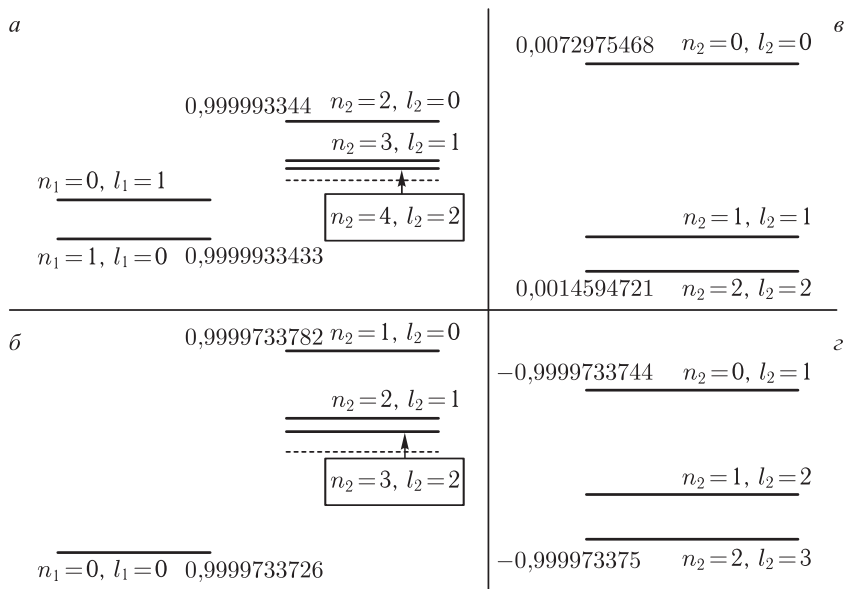


Рис. 5.10. Диаграмма ряда собственных значений энергии положительно (n_1, l_1) и отрицательно (n_2, l_2) частотных состояний частицы в кулоновском поле

5.4.3. Глубоколежащие состояния. Следующую группу состояний спектра (5.72) образуют состояния с $n_2 = l_2$. Разложение собственных значений этой группы в ряд по степеням малого параметра $Z\alpha$ качественно отличается от разложений (5.63) и (5.76) и имеет вид

$$E_{n_2, l_2=n_2}^{(2)} = m_0 c^2 \frac{Z\alpha}{2l_2 + 1} \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{2(2l_2 + 1)^2} + \dots \right). \quad (5.77)$$

Ряд состояний этой группы показан на рис. 5.10, в. Предельным состоянием этой группы (т. е. состоянием с $n_2 \rightarrow \infty$) является состояние, отвечающее собственному значению $E_{nl}^{(2)} \approx 0$. Наибольшей величиной в этой группе состояний обладает состояние, задаваемое квантовы-

ми числами ($n_2 = 0, l_2 = 0$), энергия которого определяется выражением

$$E_{00}^{(2)} = m_0 c^2 Z \alpha.$$

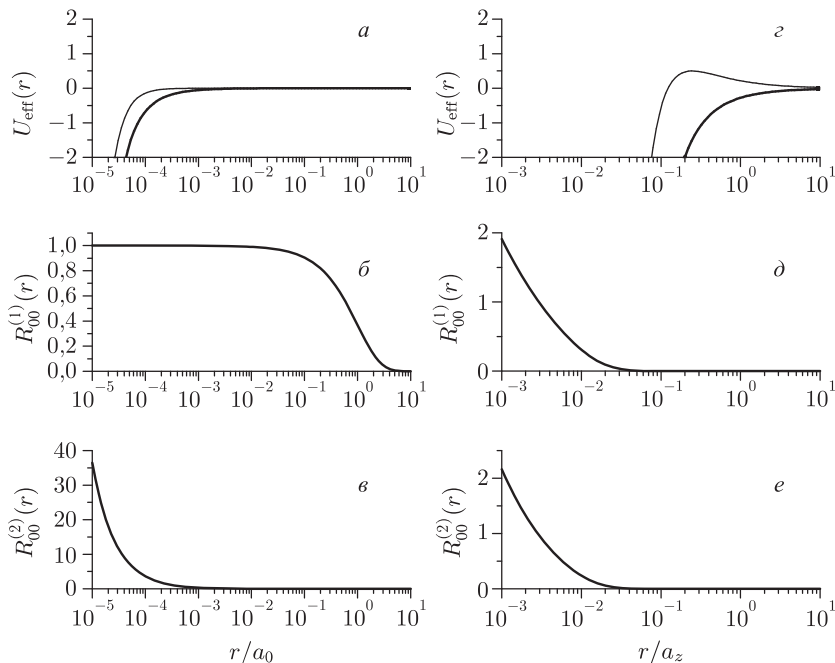


Рис. 5.11. Радиальные волновые функции $R_{n=0, l=0}^{(1)}(r)$ и $R_{n=0, l=0}^{(2)}(r)$ для случаев $Z = 1$ (б и в) и $Z = 68$ (д и е). Пространственный профиль функций $U^{(-)}(r)$ (жирная линия) и $U^{(+)}(r)$ (тонкая линия), определяемых равенством (5.70), для случаев $Z = 1$ (а) и $Z = 68$ (з)

Состояния с величиной энергии связи $\Delta E_{\mathbf{n}} = m_0 c^2 - E_{\mathbf{n}} \approx m_0 c^2$ не могут, естественно, быть рассчитаны на основе использования методов теории возмущений, поэтому в рамках традиционных теорий такие состояния частиц относят к состояниям «новых» частиц, т.е. частиц, отличных как от частиц, составляющих ядро атома, так и частиц, находящихся в атомных оболочках. Действительно, рассмотрим случай $A_{2\pi}$ -атома, т.е. связанного состояния π^+ - и π^- -мезонов. Хорошо известно, что задача о кулоновском взаимодействии двух частиц в рамках нерелятивистской теории сводится к одночастичной задаче при замене массы покоя частицы на приведенную массу

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Принимая эту модель в качестве нулевого приближения релятивистской задачи и полагая, что масса покоя π -мезонов равна $m_\pi c^2 = 139,6$ МэВ, для энергии состояния, определяемого квантовыми числами ($n_2 = 0$, $l_2 = 0$), получаем

$$E_{00} = 0,51 \text{ МэВ}.$$

Несложно видеть, что величина E_{00}/c^2 совпадает с массой покоя электрона. Пока мы ограничимся лишь констатацией этого совпадения, а последовательная интерпретация изменения массы покоя частиц во внешнем электромагнитном поле будет приведена позже, после того как мы обсудим задачи взаимодействия мезоатома с электромагнитным полем и специфику многочастичных взаимодействий (см. раздел 6.4).

Волновые функции (5.74) являются расходящимися. Тем не менее радиус экспоненциального спада указанных волновых функций играет важную роль, поскольку существенно влияет на асимптотический вид волновых функций при $r \rightarrow \infty$. Для состояний рассматриваемой группы получаем

$$\kappa_{n_2, l_2=n_2}^{-1} = a_0 \alpha \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{2(2l_2 + 1)^2} + \dots \right).$$

Как видно, величина κ^{-1} в первом приближении не зависит от заряда ядра и величины углового момента и определяется выражением

$$a_{00} = \alpha a_0 = \frac{\hbar}{m_0 c} = \alpha a_B \frac{m_e}{m_0}.$$

Несложно видеть, что величина a_{00} равна комптоновской длине волны π -мезона. Она на два порядка меньше радиуса орбит $A_{2\pi}$ -атома и на четыре порядка меньше радиуса Бора.

На рис. 5.11 показаны в сравнении радиальные волновые функции $R_{n=0, l=0}^{(1)}(r)$ и $R_{n=0, l=0}^{(2)}(r)$ для случаев $Z = 1$ (б и в) и $Z = 68$ (д и е). В случае однократно заряженного ядра радиусы распределения плотности заряда в двух указанных состояниях существенно различаются. Однако при $Z\alpha \approx 1/2$, т. е. вблизи области, где энергии двух указанных состояний становятся близки, пространственные профили волновых функций начинают совпадать. На рис. 5.11, а, г показан пространственный профиль функций $U^{(-)}(r)$ (жирная линия) и $U^{(+)}(r)$ (тонкая линия), определяемых равенством (5.70), в указанных двух случаях.

Как видно из рисунка, характерная величина пространственного распределения плотности заряда в состоянии ($n_2 = 0$, $l_2 = 0$) определяется величиной r_0 , т. е. классическим радиусом мезона. Поэтому система, состоящая из ядра и частицы в состоянии $R_{00}^{(2)}$, представляет собой не атомную систему, а элементарную частицу.

5.4.4. Подзона состояний отрицательно частотной зоны с отрицательными собственными значениями. Подзона собственных значений вблизи $E_n \approx -m_0c^2$ зеркально симметрична относительно зоны состояний (n_1, l_1) . Квантовые числа состояний этой подзоны удовлетворяют условию $l_2 > n_2$. Взаимное расположение уровней указанной серии показано на рис. 5.10, г. Предельное собственное значение состояний указанной серии $E_{nl}^{(2)} \Big|_{l \rightarrow \infty} = -m_0c^2$.

Проведенный анализ показывает, что спектр состояний (5.72) с нормированными собственными волновыми функциями (5.74) является базисом отрицательно частотных состояний частицы в притягивающем кулоновском поле. Дополнительные иллюстрации такой структуры спектра состояний представлены на рис. 5.12, где показаны в сравнении волновые функции состояний $R_{n=0, l=1}^{(1)}(r)$ и $R_{n, l=1}^{(2)}(r)$. На рис. 5.12, а показан пространственный профиль функций $U^{(+)}(r)$ (жирная линия) и $U^{(-)}(r)$ (тонкая линия), определяемых равенством (5.70). Из рисунков видно, что в то время как волновая функция $R_{n=0, l=1}^{(1)}(r)$ локализована в области $0,1a_0 \leq r \leq 10a_0$, волновые функции $R_{n, l=1}^{(2)}(r)$ локализованы в области $r \leq r_0$.

Отметим в заключение данного раздела, что собственные волновые функции, отвечающие собственным значениям $E_{nl}^{(2)}$, имеют как положительную, так и отрицательную норму. С другой стороны, энергия частицы в состоянии с собственным значением $E_{nl}^{(2)}$ определяется выражением (4.45)

$$E_{n_2 l_2} = \frac{E_{nl}^{(2)}}{m_0c^2} \int R_{nl}^{(2)}(r) \left(E_{nl}^{(2)} - U_0(r) \right) R_{nl}^{(2)}(r) r^2 dr.$$

Следовательно, энергетический спектр отрицательно частотных состояний материального поля E_n (в данном случае это есть спектр состояний античастицы или зеркальной частицы) может отличаться от спектра собственных значений $\hbar\omega_n$. В этом проявляется общее принципиальное отличие волновых уравнений, содержащих вторую производную по времени, от уравнений, операторы которых являются линейными формами оператора $i\hbar \partial/\partial t$.

5.5. Непрерывный спектр состояний в кулоновском поле

Перейдем к рассмотрению непрерывного спектра. Решения непрерывного спектра следуют из (5.54) при замене $\kappa \rightarrow -ik$ и имеют вид

$$R_1(r) = C_1(kr)^s \exp(ikr) F\left(s + 1 - i\frac{EZ\alpha}{k\hbar c}, 2(s + 1), -i2kr\right), \quad (5.78)$$

$$R_2(r) = C_2(kr)^{-(s+1)} \exp(ikr) F\left(-s - i\frac{EZ\alpha}{k\hbar c}, -2s, -i2kr\right). \quad (5.79)$$

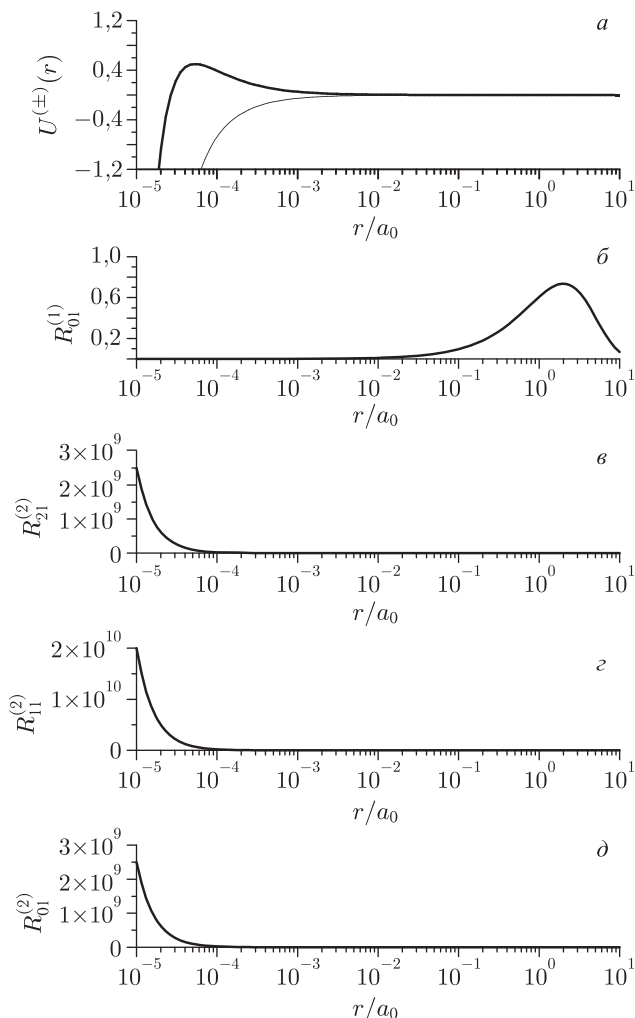


Рис. 5.12. Пространственный профиль функций $U^{(+)}(r)$ (жирная линия) и $U^{(-)}(r)$ (тонкая линия) (а); волновой функции $R_{n=0, l=1}^{(1)}(r)$ (б) и волновых функций $R_{n, l=1}^{(2)}(r)$ при $n_2 = 2$ (в), 1 (г), 0 (д)

Таким образом, учет второго линейно независимого решения в общем решении (5.54) приводит к появлению дополнительных состояний в области непрерывного спектра. Эти состояния, как несложно догадаться, связаны со спектром состояний зеркальной частицы. Действительно, волновые функции (5.78) и (5.79) имеют различное асимптотическое поведение при $r \rightarrow 0$.

При $r \rightarrow \infty$ решения (5.78)–(5.79) имеют следующую асимптотическую форму:

$$R_{El}^{(1)} = C_1 \frac{\Gamma(2(s_l + 1))}{|\Gamma(s_l + 1 + i\varepsilon)|} \times \exp\left(-\frac{\pi}{2}\varepsilon\right) \frac{1}{2kr} \sin\left[kr + \varepsilon \ln(2kr) - \frac{\pi}{2}s_l + \varphi_l^{(1)}\right], \quad (5.80)$$

$$R_{El}^{(2)} = C_2 \frac{\Gamma(-2s_l)}{|\Gamma(-s_l + i\varepsilon)|} \times \exp\left(-\frac{\pi}{2}\varepsilon\right) \frac{1}{2kr} \sin\left[kr + \varepsilon \ln(2kr) - \frac{\pi}{2}(s_l - 1) + \varphi_l^{(2)}\right], \quad (5.81)$$

где

$$\varepsilon = \frac{EZ\alpha}{k\hbar c},$$

$$\varphi_l^{(1)} = \arg \Gamma(s_l + 1 - i\varepsilon), \quad \varphi_l^{(2)} = \arg \Gamma(-s_l - i\varepsilon).$$

Формулы (5.80)–(5.81) позволяют определить нормировочные коэффициенты C_1 и C_2 .

Решение уравнения КГФ для свободной частицы, представленное в виде разложения по сферическим волнам, имеет вид

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{m_0 c^2 k}{E_k}} \frac{1}{\sqrt{r}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Волновые функции (5.5) нормированы условием

$$\frac{E_k + E_{k'}}{2m_0 c^2} \int \psi_{klm}^*(\mathbf{r}) \psi_{k'l'm'}(\mathbf{r}) dV = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(k - k'),$$

а радиальная часть волновой функции при $r \rightarrow \infty$ имеет следующую асимптотическую форму:

$$R_{El} = \sqrt{\frac{2m_0 c^2}{\pi E_k}} \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right).$$

Приведение асимптотических выражений (5.80) и (5.81) к указанному виду позволяет определить нормировочные коэффициенты $C_{1,2}$:

$$C_1 = \sqrt{\frac{2m_0 c^2}{\pi E_k}} \frac{2k |\Gamma(s_l + 1 + i\varepsilon)|}{\Gamma(2(s_l + 1))} \exp\left(\frac{\pi}{2}\varepsilon\right),$$

$$C_2 = \sqrt{\frac{2m_0 c^2}{\pi E_k}} \frac{2k |\Gamma(-s_l + i\varepsilon)|}{\Gamma(-2s_l)} \exp\left(\frac{\pi}{2}\varepsilon\right).$$

Согласно общему правилу отрицательно частотные решения для частицы являются комплексно сопряженными положительно частотными решениями для зарядово-сопряженной частицы. Уравнение для зарядово-сопряженной частицы имеет вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1) - Z^2 \alpha^2}{r^2} - \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + k^2 \right] R_l(r) = 0. \quad (5.82)$$

Зарядово-сопряженная частица движется в отталкивающем потенциале, поэтому уравнение (5.82) отличается от уравнения (5.53) лишь знаком Z . Следовательно, положительно частотные решения уравнения для зарядово-сопряженной частицы определяются формулами (5.78)–(5.79), в которых нужно произвести замену $Z \rightarrow -Z$.

Таким образом, отрицательно частотные решения для частицы, относящиеся к непрерывному спектру, имеют вид

$$R_1^{(-)}(r) = C_1(kr)^s \exp(-ikr) F\left(s + 1 - i\frac{EZ\alpha}{k\hbar c}, 2(s + 1), i2kr\right),$$

$$R_2^{(-)}(r) = C_2(kr)^{-(s+1)} \exp(-ikr) F\left(-s - i\frac{EZ\alpha}{k\hbar c}, -2s, i2kr\right).$$

Асимптотический вид указанных волновых функций и нормировочные коэффициенты совпадают с вышеприведенными формулами при использовании замены $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$.

5.6. Строение атома и атомные процессы в релятивистски инвариантной теории скалярного материального поля

Итак, проведенный математический анализ задачи о движении частицы в кулоновском поле показал существование кардинальных различий в спектре состояний материального поля, предсказываемом решением волнового уравнения со второй производной по времени, по сравнению со спектром состояний, следующим из решения волновых уравнений, линейных по оператору $i\hbar \partial/\partial t$. Кардинальные отличия состоят в том, что связанными могут быть состояния не только положительно, но и отрицательно частотных зон, которые, как показал анализ одномерных задач рассеяния, можно связать с состояниями частиц и зеркальных частиц соответственно.

Вместе с тем следует отметить, что и стандартный спектр состояний релятивистской краевой задачи отличается от спектра состояний нерелятивистской задачи. Несложно догадаться, что эти качественные и количественные отличия логически связаны друг с другом. Несомненно, что отличие математических решений различных волновых уравнений свидетельствуют об отличии физических свойств материальных полей, описываемых этими уравнениями.

В настоящем разделе мы применим аппарат преобразований симметрии для дальнейшей интерпретации состояний рассчитанного выше спектра.

5.6.1. Зеркальная симметрия: отрицательный угловой момент.

Используя разложение собственных значений в ряд по малому параметру $Z\alpha$, в предыдущих разделах мы показали, что преобразование $l_2 \rightarrow -(l_1 + 1)$ отражает наличие зеркальной симметрии между спектрами (5.57) и (5.72). Это преобразование имеет на самом деле более глубокую математическую основу. Действительно, собственные

значения и собственные волновые функции отрицательно частотной зоны состояний имеют вид

$$E_{n_2 l_2} = \frac{m_0 c^2 (n_2 - s_2)}{\sqrt{(n_2 - s_2)^2 + Z^2 \alpha^2}}, \quad (5.83)$$

$$\psi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{r}) = C_{n_2 l_2} Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi) L_{n_2}^{(-2s_2-1)}(2\kappa r) (2\kappa r)^{-(s_2+1)}, \quad (5.84)$$

где $C_{n_2 l_2}$ — нормировочная константа радиальной волновой функции (5.74), а параметр s_2 имеет вид

$$s_2 = \sqrt{(l_2 + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} - 1/2.$$

Запишем параметр s_2 в следующем тождественном виде:

$$s_2 = (l_2 + 1/2) \sqrt{1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{(l_2 + 1/2)^2}} - \frac{1}{2}.$$

Полагая $l_2 = -(l_1 + 1)$, получаем

$$s_2|_{l_2=-(l_1+1)} = -s_1 - 1, \quad (5.85)$$

где

$$s_1 = \sqrt{(l_1 + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} - 1/2.$$

Учтем следующее свойство шаровых функций:

$$Y_{l_2 m}(\theta, \varphi)|_{l_2=-l_1-1} = (-1)^{l_1} Y_{l_1 m}(\theta, \varphi). \quad (5.86)$$

Подставляя (5.85) и (5.86) в (5.83)–(5.84), получаем

$$E_{n_2 l_2=-(l_1+1)} = \frac{m_0 c^2 (n_2 + s_1 + 1)}{\sqrt{(n_2 + s_1 + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}}, \quad (5.87)$$

$$\begin{aligned} \psi_{n l_2 m}^{(2)}(\mathbf{r}) \Big|_{l_2=-(l_1+1)} &= (-1)^{l_1} C_{n l_1} Y_{l_1 m}(\theta, \varphi) L_n^{(2s_1+1)}(2\kappa r) (2\kappa r)^{s_1} = \\ &= (-1)^{l_1} \psi_{n l_1 m}^{(1)}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Как видно, получившиеся выражения совпадают с выражениями для собственных значений (5.57) и собственных волновых функций (5.62) стандартного базиса состояний. Учитывая далее, что $Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$, получаем

$$\psi_{n l_2 m}^{(2)}(-\mathbf{r}, t) \Big|_{l_2=-(l_1+1)} = \psi_{n l_1 m}^{(1)}(\mathbf{r}, t). \quad (5.88)$$

Таким образом, собственные значения (5.83) и собственные волновые функции (5.84) являются аналитическим продолжением собственных значений (5.57) и собственных волновых функций (5.62) стандартного базиса состояний на область отрицательных значений углового момен-

та. Такое расширение пространства состояний частицы вполне закономерно. Действительно, мы уже неоднократно отмечали, что фазовое пространство состояний материального поля, описываемого уравнением второго порядка по временной производной, вдвое шире пространства состояний материального поля, описываемого уравнением с первой временной производной.

Такое удвоение пространства состояний приводит к тому, что, как было показано в предыдущей главе, преобразования CPT -симметрии становятся двузначными, что является одним из кардинальных отличий CPT -преобразований релятивистских волновых уравнений со второй производной по времени от CPT -преобразований волновых уравнений, являющихся линейными формами оператора $i\hbar \partial/\partial t$. Вместе с тем следует отметить, что симметрия положительно и отрицательно частотных решений уравнения КГФ, определяющаяся соотношением (5.88), является новым типом симметрии, возникающей лишь в рамках теорий, основанных на волновых уравнениях со второй производной по времени. Как мы увидим позже, она присуща и спинорным материальным полям, однако ввиду различия уравнений скалярных и спинорных полей, математическая запись преобразования зеркальной симметрии для спинорных полей будет отличаться от (5.88).

Чтобы показать отличие преобразования (5.88) от преобразований CPT -симметрии, обсудим преобразования CPT -симметрии для частицы, взаимодействующей с кулоновским полем. Преобразование P_1 связывает решения задач о движении частицы во внешних полях, обладающих следующими свойствами: $\varphi'(-\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}'(-\mathbf{r}) = -\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Кулоновский потенциал обладает указанной симметрией и соответствующее преобразование определяется соотношением, следующим из свойств шаровых функций:

$$\psi_{nlm}^{(\lambda)}(-\mathbf{r}, t) = (-1)^l \psi_{nlm}^{(\lambda)}(\mathbf{r}, t).$$

Преобразование T_1 -симметрии связывает решения задач о движении частицы во внешних полях, обладающих следующими свойствами: $\varphi'(\mathbf{r}, -t) = -\varphi(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{E}'(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. В случае кулоновского поля это означает наличие связи между решениями задач о движении частицы в притягивающем и отталкивающем кулоновских потенциалах. В случае движения частицы в кулоновском поле эта симметрия обусловлена тем, что уравнение, комплексно сопряженное уравнению (4.3) для частицы, взаимодействующей с притягивающим кулоновским полем, совпадает с уравнением для частицы, взаимодействующей с отталкивающим кулоновским полем. Следовательно, спектр собственных значений задачи о движении частицы в отталкивающем поле противоположен по знаку спектру собственных значений задачи о движении частицы в притягивающем потенциале. Действительно, условия (5.56а, б) могут удовлетворяться лишь при $E < 0$.

В результате получаем

$$\psi_{nlm}^{(\lambda)}(\mathbf{r}, t) \Big|_{Z>0} = \psi_{nlm}^{(\lambda)}(\mathbf{r}, -t) \Big|_{Z<0},$$

где Z определяет заряд ядра мезоатома $q_n = Zq_0$ или заряд частицы q_0 , т. е. определяет знак потенциальной энергии (5.50), пропорциональный произведению $q_0q_n = -Zq_0^2$, что соответствует притягивающему ($Z > 0$) или отталкивающему ($Z < 0$) кулоновским полям.

Преобразование P_2 -симметрии связывает решения задач о движении частицы во внешних полях, обладающих следующими свойствами: $\varphi'(-\mathbf{r}, t) = -\varphi(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{E}'(-\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. Эта симметрия является следствием следующего свойства шаровых функций:

$$Y_{lm}^*(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^m Y_{l,-m}(\theta, \varphi)$$

и принимает вид

$$\psi_{n,l,m}^{(\lambda)}(\mathbf{r}, t) \Big|_{Z>0} = (-1)^m \psi_{n,l,-m}^{(\lambda)*}(-\mathbf{r}, t) \Big|_{Z<0}.$$

Преобразование T_2 связано со следующим свойством шаровых функций: $Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) = (-1)^{l-m} Y_{l,-m}(\theta, \varphi)$ и имеет вид

$$\psi_{n,l,m}^{(\lambda)*}(\mathbf{r}, -t) = (-1)^{l-m} \psi_{n,l,-m}^{(\lambda)}(\mathbf{r}, t).$$

Как видно, рассмотренные преобразования симметрии связывают решения, относящиеся к одному из спектров, (5.57) или (5.72). Эти решения могут быть одинаковой частотности, как в случае операций P_1 и T_2 , или разной. В последнем случае они отличаются лишь знаком. Принципиальное отличие преобразования зеркальной симметрии (5.88) от вышеуказанных состоит в том, что оно связывает положительно и отрицательно частотные решения одного и того же уравнения и поэтому не сводится к комбинации преобразований группы CPT -симметрии.

5.6.2. Процессы в атомах, происходящие с изменением и без изменения состояния атомного ядра. Таким образом, преобразования симметрии (5.87)–(5.88) неоспоримо указывают на то, что собственные волновые функции $\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$ спектра состояний (5.91) связаны с отрицательным угловым моментом, т. е. описывают движение, обратное по отношению к движению частиц, находящихся в состояниях стандартного спектра состояний. В качестве дополнительной иллюстрации можно указать на тот факт, что соотношение (5.88) связывает состояния с противоположными значениями проекции вектора углового момента. Естественно поэтому, что мы связываем базис состояний (5.83)–(5.84) с базисом состояний зеркальных частиц.

Следует отметить, что наличие связи волновых функций двух базисов, определяемой соотношением (5.88), дает строгое математическое доказательство конечности нормы волновых функций $\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$, несмотря на то что они являются сингулярными в нуле. Вместе

с тем именно сингулярность волновых функций $\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$ приводит к принципиальным физическим следствиям. Сингулярность волновых функций $\psi_{nlm}^{(2)}$ означает, что состояния зеркальных частиц определяют состояние ядра атома, а не состояние его внешних оболочек (с учетом вышеприведенных оговорок и в целях наглядности интерпретации можно говорить о состоянии электронных оболочек атома). Состояние атомных оболочек атомоподобной системы (атома, мезоатома, адронного атома и т. д.) определяется разложением волновой функции по базису состояний волновых функций $\psi_{nlm}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$. Следовательно, во время как переходы между состояниями стандартного базиса состояний описывают процессы, происходящие в атомной оболочке, переходы между состояниями положительно и отрицательно частотных зон описывают процессы, приводящие к изменению как состояния внешней оболочки атома, так и его ядра.

Если зеркальная частица переходит из непрерывного спектра в одно из дискретных состояний, то энергия ядра атома увеличивается на величину энергии связи зеркальной частицы. Это утверждение является следствием общих соображений, состоящих в том, что волновая функция зеркальной частицы является комплексно сопряженной с волновой функцией зарядово-сопряженной частицы в отталкивающем потенциале. Как мы показали выше, зарядово-сопряженной частице отвечает знак минус в (5.72). Вместе с тем собственное значение для частицы является положительным. Следовательно, норма отрицательно частотных состояний частицы является отрицательной, поскольку при операции комплексного сопряжения знак нормы радиальной волновой функции не изменяется. Рисунок 5.10 наглядно иллюстрирует тот факт, что энергия связи зеркальной частицы, находящейся в любом из состояний с $n_2 > s_l$, всегда меньше энергии связи частицы, находящейся в основном состоянии стандартного спектра состояний. Это обуславливает стабильность атомоподобных систем. В атомах с легкими ядрами, $Z\alpha \ll 1$, размеры области пространственной локализации частиц, находящихся в состояниях с волновыми функциями $\psi_{nlm}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ и $\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$, различаются на несколько порядков. Следовательно, вероятность межзонных переходов весьма мала. Однако с ростом $Z\alpha$, как следует из иллюстрации, представленной на рис. 5.11, эти пространственные масштабы начинают сближаться. Более того, как следует из вышеприведенных формул и рис. 5.9, с ростом $Z\alpha$ собственные значения спектров (5.57) и (5.72), отвечающие одинаковым значениям радиального квантового числа и углового момента, начинают совпадать. Это приводит к тому, что вероятность внутризонных переходов между состояниями стандартного базиса начинает совпадать с вероятностью межзонных переходов. Например, при $Z\alpha = 1/2$ энергии уровней $(n_1 = 0, l_1 = 0)$ и $(n_2 = 0, l_2 = 0)$ совпадают. Следовательно, водородоподобный ион (или ионный мезоатом) при заряде ядра $Z\alpha = 1/2$

перестает быть устойчивой атомоподобной системой и распадается на орбитки с меньшим зарядом ядра иона.

В свою очередь из решения уравнения Дирака для частицы с полужелым спином, взаимодействующей с кулоновским полем, следует, что область существования стабильных атомов определяется выражением $Z\alpha = 1$. Следует, однако, заметить, что спектр, представленный на рис. 5.9, есть спектр состояний скалярной частицы в кулоновском поле, т.е. это спектр связанных состояний отрицательно заряженной частицы конечной массы, взаимодействующей с положительно заряженной частицей бесконечной массы, и при этом спины обеих частиц равны нулю. Учет конечности массы и ненулевого спина ядра может существенно изменить вид спектра. Как мы увидим в последующих главах, область существования стабильных состояний частицы с полужелым спином в кулоновском поле практически совпадает с областью существования стабильных атомов. Таким образом, бесспорным является вывод о том, что область существования стабильных состояний нейтральных частиц в кулоновском поле по отношению к величине заряда ядра практически вдвое уже области существования стабильных состояний частиц с полужелым спином в том же поле. Причиной указанной нестабильности является совпадение энергии и собственных волновых функций стационарных состояний частицы и зеркальной частицы, отвечающих угловому моменту $l_1 = l_2 = 0$.

5.6.3. О связи базисов пространственных волновых функций положительно и отрицательно частотных зон.

Выше мы показали, что волновые функции $\psi_{nlm}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ образуют полный ортогональный базис состояний частицы, а волновые функции $\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$ — полный ортогональный базис зеркальной частицы. Волновые функции

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n, l, m} A_{nlm} R_{nl}^{(1)}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \exp\left(-i \frac{E_{nl}^{(1)}}{\hbar} t\right)$$

определяют состояние внешней оболочки атомоподобных систем, а волновые функции

$$\psi^{(2)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{nlm} B_{nlm} R_{nl}^{(2)}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \exp\left(-i \frac{E_{nl}^{(2)}}{\hbar} t\right)$$

определяют состояние ядра атома, поскольку область пространственной локализации зеркальных частиц при $Z\alpha \ll 1$ имеет порядок классического радиуса частицы.

Решения $\psi_{nlm}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ и $\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$ линейно независимы при любых значениях квантовых чисел (n, l, m) , поскольку собственные значения $E_{nlm}^{(1)}$ и $E_{nlm}^{(2)}$ не совпадают. Однако если мы обратимся к пространственным частям $\psi_{nlm}^{(\lambda)}(\mathbf{r})$ указанных собственных волновых функций, то из общих соображений вполне очевидно, что собственные волновые

функции $\psi_{nlm}^{(1)}(\mathbf{r})$ и $\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r})$ не обязаны быть ортогональными друг другу, поскольку они являются решениями различных краевых задач для двух различных потенциалов $U_{eff}^{(\pm)}$, определяемых формулой (5.70). Действительно, асимптотическое поведение волновых функций $R_{nl}^{(1)}$ и $R_{nl}^{(2)}$ при $r \rightarrow 0$, задающее вид граничных условий указанных двух краевых задач, определяется выражениями

$$R_{nl}^{(1)}(r)\Big|_{r \rightarrow 0} = C_1 r^{s_l}, \quad R_{nl}^{(2)}(r)\Big|_{r \rightarrow 0} = C_2 r^{-s_l - 1}.$$

Итак, в то время как волновые функции каждой из краевых задач являются ортогональными, волновые функции различных краевых задач ($R_{nl}^{(1)}$ и $R_{n'l'}^{(2)}$) ортогональными не являются. Следовательно, каждую волновую функцию одного из базисов мы можем разложить по волновым функциям другого базиса. Ввиду ортогональности шаровых функций разложения радиальных волновых функций $R_{nl}(r)$ будут включать функции с одинаковым значением углового момента l . Например:

$$R_{nl}^{(2)}(r) = \sum_p C_{np} R_{pl}^{(1)}(r).$$

Коэффициенты разложения C_{np} определяются из условия ортогональности радиальных волновых функций $R_{nl}^{(1)}(r)$ и имеют вид

$$C_{np} = \frac{1}{m_0 c^2} \int_0^\infty R_{pl}^{(1)}(r) \left(\frac{E_p^{(1)} + E_n^{(2)}}{2} - U(r) \right) R_{nl}^{(2)}(r) r^2 dr.$$

Коэффициенты разложения волновой функции состояний $(n_2 = 0, l_2 = 0)$ и $(n_2 = 1, l_2 = 0)$ по волновым функциям состояний $(n_1 = n, l_1 = 0)$ представлены на рис. 5.13 и рис. 5.14 соответственно. Из рисунков видно, что состояние $(n_2 = 0, l_2 = 0)$ слабо связано с состояниями $(n_1 = n, l_1 = 0)$ при $Z = 1$. Однако с ростом Z , когда собственные значения состояний $(n_2 = 0, l_2 = 0)$ и $(n_1 = 0, l_1 = 0)$ начинают сближаться (см. рис. 5.9), коэффициент $C(n_2 = 0, n_1 = 0)$ стремится к единице. Напротив, состояние $n_2 = 1$ сильно связано с ближайшим состоянием $n_1 = 0$ при $Z = 1$, а с ростом Z величина коэффициента $C(n_2 = 1, n_1 = 0)$ резко падает. Эмпирическое правило, следующее из представленных зависимостей, состоит в том, что с ростом Z сильно связанными оказываются состояния спектров $E_{nl}^{(1)}$ и $E_{nl}^{(2)}$, величина которых при $Z \rightarrow Z_0 \approx 1/2\alpha$ совпадает.

Отмеченная специфика собственных волновых функций положительно и отрицательно частотных зон указывает на то, что при взаимодействии мезоатома с поперечным электромагнитным полем правила отбора совпадают с правилами отбора для переходов между состояниями стандартного базиса. Однако в дополнение к указанным переходам появляются межзонные (электронно-ядерные) переходы, обусловлен-

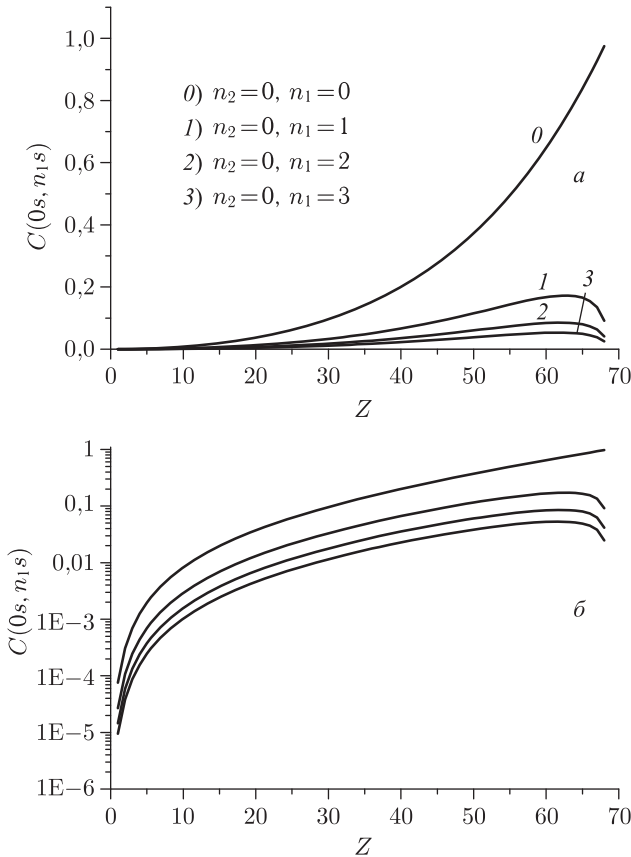


Рис. 5.13. Зависимость коэффициентов разложения волновой функции состояний ($n_2 = 0, l_2 = 0$) по волновым функциям состояний ($n_1 = n, l_1 = 0$) от заряда ядра Z

ные взаимодействием со скалярным полем, например запрещенные 0-0 переходы. Наличие таких переходов следует из общей формулы (4.27) и связано со следующим слагаемым этой формулы:

$$V_{nm}^{(4)} = \frac{q_0}{m_0 c^2} \int \psi_n^* \left[\varphi_e \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U(r) \right) - \frac{q_0}{2} \varphi_e^2 \right] \psi_m dV.$$

В симметризованном виде первое из указанных двух слагаемых принимает вид

$$V_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} = \int \varphi_e(\mathbf{r}, t) \rho_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')}(\mathbf{r}, t) dV,$$

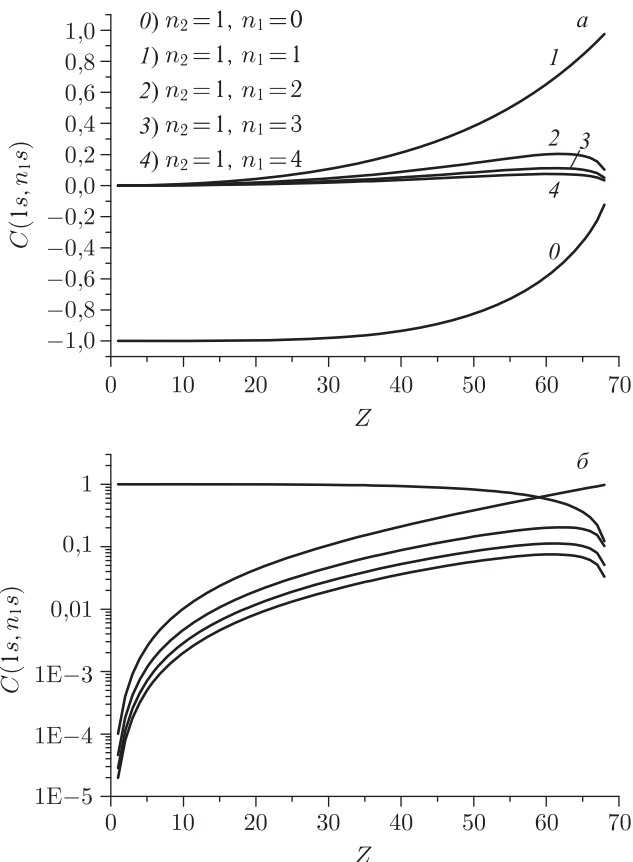


Рис. 5.14. Зависимость коэффициентов разложения волновой функции состояний ($n_2 = 1, l_2 = 0$) по волновым функциям состояний ($n_1 = n, l_1 = 0$) от заряда ядра Z

где

$$\rho_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} = \frac{q_0}{m_0 c^2} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \frac{\partial \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}}{\partial t} - \frac{\partial \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*}}{\partial t} \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right) - \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} U \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right]. \quad (5.89)$$

Как видно из (5.89), матричные элементы переходов между состояниями с одинаковым значением углового момента не равны нулю при взаимодействии мезоатома с изотропным скалярным внешним полем $\varphi_e(\mathbf{r}, t) = \varphi_e(r, t)$, а также и в длинноволновом приближении, когда $\varphi_e(\mathbf{r}, t) \approx \varphi_e(t)$. В последнем случае матричные элементы оператора V принимают вид

$$V_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} = \varphi_e(t) \int \rho_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} dV.$$

Указанные матричные элементы обращаются в нуль для переходов между состояниями стандартного базиса ввиду ортогональности собственных волновых функций каждого из базисов $\int \rho_{nm}^{(\lambda, \lambda)} dV = \delta_{nm}$.

5.6.4. О полном спектре состояний частицы в кулоновском поле. Интегральный спектр состояний частицы, представленный на рис. 5.9, несимметричен относительно замены $E \rightarrow -E$. Остановимся на обсуждении причины отсутствия указанной симметрии. Эта причина весьма проста и состоит в том, что решения уравнений (5.56а, б) являются двузначными:

$$E_{nl}^{(1)} = \pm \frac{m_0 c^2 (n + s_l + 1)}{\sqrt{(n + s_l + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}}, \quad (5.90)$$

$$E_{nl}^{(2)} = \pm \frac{m_0 c^2 (n - s_l)}{\sqrt{(n - s_l)^2 + Z^2 \alpha^2}}. \quad (5.91)$$

Наличие двух знаков в указанных соотношениях вполне естественно и является следствием зарядовой симметрии, состоящей в том, что уравнение (4.3) совпадает с комплексно сопряженным уравнением для зарядово-сопряженной частицы.

При расчете отрицательно частотного спектра состояний частицы в притягивающем кулоновском поле мы следовали алгоритму, изложенному в гл. 4, связав его с положительно частотным спектром состояний зарядово-сопряженной частицы в отталкивающем поле. В результате мы показали, что собственным значениям задачи о движении частицы в притягивающем кулоновском поле отвечает знак плюс в обоих выражениях, (5.90) и (5.91). Следовательно, общее решение (5.54) уравнения (5.53) включает в себя одновременно как положительно, так и отрицательно частотные решения.

Учет двух знаков в выражениях (5.90)–(5.91) приводит к появлению состояний, собственные значения которых зеркально симметричны по отношению к собственным значениям, приведенным на рис. 5.9. Таким образом, при учете двух знаков Z в уравнении (5.51) спектр, представленный на рис. 5.9, становится симметричным относительно плоскости $E = 0$. Встает естественный вопрос: каким состояниям материального поля отвечают собственные значения (5.90)–(5.91) с учетом не только их величины, но и знака?

Ответ на этот вопрос достаточно прост и состоит в том, что знаки минус в (5.90)–(5.91) описывают спектр собственных значений уравнения для комплексно сопряженной волновой функции ψ^* . В рамках аппарата квантовой электродинамики именно решения уравнения для ψ^* ставится в соответствие термин античастица. Следовательно, в рамках теорий, линейных по оператору p_4 , заведомо предполагается, что волновые функции ψ и ψ^* являются компонентами единого материального поля. Необходимость такого предположения вполне понятна, поскольку при фиксированном значении пространственных квантовых

чисел решения уравнений, линейных по оператору p_4 , содержат лишь одну временную экспоненту, которая, исходя из соображений, изложенных во введении к предыдущей главе, выбирается, разумеется, положительно частотной.

Принципиальной чертой уравнений, включающих вторую производную по времени, является тот факт, что общее решение этих уравнений включает как положительно, так и отрицательно частотные решения. Как мы видели, положительно и отрицательно частотные спектры состояний частицы в неоднородном внешнем поле кардинально отличаются друг от друга и не являются зеркально симметричными относительно плоскости $E = 0$. Именно эта специфика спектров частицы в пространственно неоднородном поле является наглядной иллюстрацией того, что пространство состояний материальных полей, описываемых уравнениями, квадратичными по оператору p_4 , удваивается по сравнению с пространством состояний материальных полей, описываемых уравнениями, линейными по оператору p_4 . Собственные значения указанных двух зон отвечают состояниям частицы и зеркальной частицы соответственно. Процессы взаимодействия материального поля с электромагнитным полем, происходящие с участием частиц и зеркальных частиц, описываются в рамках одночастичной теории, поскольку отвечающие им волновые функции являются решениями одного и того же уравнения.

Как следует из результатов проведенного выше обсуждения, при анализе задач о взаимодействии частицы с электромагнитным полем нет необходимости прибегать к использованию понятия «античастица», даже для описания процессов с изменением числа частиц. Поэтому в рамках теорий, основанных на использовании уравнений, включающих вторую производную по времени, уравнение для зарядово-сопряженной частицы может рассматриваться как волновое уравнение отдельного материального поля, описывающего состояние частиц, характеризующихся теми же инерционными свойствами, т. е. $m_0^{(C)} = m_0$, и противоположным зарядом $q_0^{(C)} = -q_0$. Существование таких дуальных частиц предсказывается общей группой преобразований Лоренца.

В конце предыдущей главы при анализе симметричных свойств волновых функций полей, описываемых уравнением КГФ, мы ввели двухкомпонентную волновую функцию

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^* \end{pmatrix}.$$

Проведенный анализ показал, что волновая функция Ψ_0 не является инвариантной относительно преобразований общей группы Лоренца. Однако при этом мы полагали, что волновые поля ψ и ψ^* являются невзаимодействующими, т. е. уравнения для волновых функций ψ и $\psi_C = \psi^*$ являются независимыми материальными уравнениями. Естественно, что в этом случае взаимодействие частицы и зарядово-сопря-

женной частицы должно описываться в рамках двухчастичной теории. В следующей главе мы покажем, что волновая функция, возникающая в теории взаимодействующих скалярных полей, является прямым произведением волновых функций: $\Psi = \psi \otimes \psi_C$. Как мы увидим, уравнение для волновой функции Ψ существенно отличается от уравнения для волновой функции Ψ_0 , что свидетельствует о том, что теория взаимодействующих скалярных материальных полей кардинально отличается от теории невзаимодействующих полей.

Заключительные замечания

В предыдущей главе мы уже говорили о том, что систематика состояний материального поля, основанная на анализе решений уравнения (4.3) для свободной частицы, не может дать адекватного представления о физически различных его состояниях. Это связано с тем, что в случае свободной частицы спектры состояний частицы и зарядово-сопряженной частицы перекрываются. В частности, отрицательно частотный спектр состояний зарядово-сопряженной частицы совпадает со спектром состояний зеркальной частицы. Как мы видели, в пространственно неоднородном внешнем поле два указанных спектра начинают кардинально различаться.

Действительно, решение задачи о движении частицы в кулоновском поле наглядно показывает, что состояния частицы и зеркальной частицы связаны с двумя линейно независимыми временными решениями уравнения (4.3), а следовательно, и различными пространственными решениями. Анализ одномерной задачи отражения частицы от потенциальной ступеньки также показывает, что в области рождения зеркальных частиц, т. е. $m_0c^2 \leq E \leq U_0 - m_0c^2$, волновая функция частицы описывается вторым линейно независимым решением уравнения (4.3). Мы не акцентировали внимания на этом обстоятельстве в разделах 5.1.1–5.1.2, однако явно указали на него в разделе 5.1.5. Впрочем, иллюстрации, представленные на рис. 5.2, на наш взгляд, наглядно это обстоятельство демонстрируют.

Таким образом, результаты анализа, проведенного в настоящей главе, наглядно показывают, что последовательная теория зеркальных частиц базируется на использовании понятия запрещенной зоны состояний, разделяющей зоны положительно и отрицательно частотных состояний сплошного спектра. Профиль запрещенной зоны определяется профилем внешнего потенциального поля, поэтому к зонам положительно и отрицательно частотных состояний сплошного спектра могут примыкать соответствующие им спектры дискретных состояний. Понятие о запрещенной зоне состояний неизбежно влечет за собой понятие отрицательной вероятности. Оба эти понятия возникают лишь в рамках теорий, основанных на волновых уравнениях материального поля, включающих вторую производную по времени.

Глава 6

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СКАЛЯРНОЙ ЧАСТИЦЫ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

«Экзотические» атомы, одним из примеров которых являются мезоатомы, образуются в результате захвата отрицательно заряженных частиц (μ^- , π^- , K^- , Σ^- , \bar{p} , ...) на стационарные уровни атома. Этот процесс аналогичен процессу рекомбинации ионизованных электронов в плазме, являющемуся одним из базовых процессов, определяющих свойства равновесной или квазиравновесной плазмы. Указанная аналогия свидетельствует о том, что и основные механизмы этих двух процессов являются сходными. Действительно, необходимость одновременного выполнения законов сохранения энергии и импульса приводит к тому, что основными механизмами захвата являются тройные столкновения частиц, радиационные переходы между состояниями непрерывного и дискретного спектра, стимулируемые электромагнитным полем, возникающим в результате столкновений частиц, и т. д.

Учитывая тот факт, что радиус орбит стационарных состояний частицы в центрально-симметричном внешнем поле растет с ростом радиального квантового числа n , а вероятность захвата пропорциональна степени вырождения уровня $(2l + 1)$, несложно видеть, что захваченная частица оказывается, как правило, в возбужденном состоянии (n, l) с большими значениями радиального квантового числа n и углового момента l . В результате последующего каскада радиационных переходов из состояний высокой энергии в низколежащие состояния захваченная частица стремится оказаться в основном состоянии $(n = 0, l = 0)$. Когда частица оказывается на уровне, лежащем вблизи энергии K — оболочки атома (т.е. основного состояния электронов атома), кулоновский потенциал ядра атома уже в незначительной степени экранируется атомными электронами и энергетическая структура уровней начинает хорошо согласовываться с энергетическим спектром, рассчитанным в предыдущей главе.

В отличие от обычных атомов, основное состояние экзотических атомов не является стабильным. В случае мезоатомов причины указанной нестабильности следуют из результатов расчета спектра состояний скалярной частицы в кулоновском поле, приведенных в предыдущей главе, и обусловлены следующими причинами.

Во-первых, область существования стабильных мезоатомов по отношению к заряду ядра, как было показано в разделе 5.3, определяется условием $Z\alpha < 1/2$ и приблизительно вдвое уже области существования стабильных атомов. Причины указанных различий

обусловлены тем, что спинорная частица, наряду с трансляционным движением, совершает движение и по внутренним степеням свободы. Расчеты спектров связанных состояний частиц с полуцелым спином в кулоновском поле будут приведены в последующих главах книги.

Во-вторых, электрон является одной из легчайших частиц, поэтому радиус оболочки мезоатома меньше радиуса Бора в отношении масс электрона и мезона: $a_0 = a_B m_e / m_0$. В мезоатомах с тяжелыми ядрами радиус оболочки приближается к размерам ядра.

В-третьих, несмотря на то что радиус экспоненциального спада волновых функций подзоны состояний отрицательно частотного спектра с $E^{(2)} \approx m_0 c^2$ совпадает с a_0 , собственные волновые функции состояний спектра (n_2, l_2) являются сингулярными в нуле, поэтому частица, находящаяся в этих состояниях, большую часть времени находится в пределах ядра атома. Следовательно, межзонные радиационные переходы приводят к кардинальному изменению состояния атомоподобных систем. Как мы отмечали выше, собственные волновые функции положительно частотной зоны состояний частицы в кулоновском поле всегда имеют положительную норму. В свою очередь, норма волновых функций отрицательно частотной зоны зависит от знака $\Gamma(n_2 - 2s_l)$ и может быть как положительной, так и отрицательной. Следовательно, если частица в результате захвата оказалась в одном из состояний спектра $E_{nl}^{(1)}$, то в результате межзонных переходов она может перейти в одно из состояний спектра $E_{nl}^{(2)}$ с положительной нормой. Поскольку волновые функции (5.74) сингулярны в нуле, указанный процесс аналогичен процессу K -захвата в обычных атомах. Действительно, поскольку заряд частицы не изменяется при таком переходе, то заряд ядра становится меньше на единицу: $Z_f = Z - 1$. Согласно закону сохранения заряда, переход частицы из состояния спектра $E_{nl}^{(1)}$ в одно из состояний спектра $E_{nl}^{(2)}$ с отрицательной нормой волновой функции обязательно сопровождается появлением двух частиц в состояниях с положительной нормой волновой функции. Если состояние с отрицательной нормой волновой функции является связанным, а состояния с положительной нормой принадлежат спектру $E_{nl}^{(1)}$, то этот процесс становится аналогичным процессу β^- -распада в обычных атомах. Процессом, аналогичным β^+ -распаду в обычных атомах, является процесс, в котором конечным связанным состоянием спектра $E_{nl}^{(2)}$ оказывается состояние с положительной нормой волновой функции, а состояние с отрицательной нормой является конечным состоянием непрерывного положительно частотного спектра.

В-четвертых, как было показано в разделе 5.3.3, переход частицы из подзоны состояний с $E \approx m_0 c^2$ в подзону состояний отрицательно частотной зоны с $E^{(2)} \approx 0$ приводит к качественным отличиям свойств исходных частиц от свойств частиц — продуктов реакции, поскольку массы покоя частиц и радиус области их пространственной локализации существенно различаются.

Если атомный захват происходит в макроскопической среде, то наряду с радиационным спонтанным распадом высоколежащих состояний имеют место и процессы вынужденных переходов частицы из состояний дискретного спектра в состояния континуума, обусловленные взаимодействием атома с фотонами, рождающимися в процессе радиационного распада соседних атомов. Таким образом, исследование радиационных процессов в «экзотических» атомах представляет фундаментальный интерес как с точки зрения изучения процессов атомного захвата, так и с точки зрения взаимодействия частиц с ядром атома.

6.1. Взаимодействие мезоатома с электромагнитным полем

Рассчитанный в предыдущей главе спектр состояний частицы в кулоновском поле дает базу для анализа задачи о взаимодействии мезоатома с внешним электромагнитным полем. Общий алгоритм решения указанной задачи мы обсудили в разделе 4.1.2. В настоящем разделе мы остановимся на обсуждении матричных элементов оператора взаимодействия атома с полем внешней электромагнитной волны.

6.1.1. Сохранение заряда. Уравнение для мезоатома, взаимодействующего с внешним электромагнитным полем, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0\varphi(\mathbf{r}, t) \right)^2 \psi(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m_0^2c^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t), \quad (6.1) \end{aligned}$$

где 4-потенциал электромагнитного поля является суперпозицией нестационарного внешнего поля $A_\mu^{(e)}(\mathbf{r}, t)$ и стационарного внутриатомного $A_\mu^{(0)}(\mathbf{r})$.

Уравнение непрерывности, следующее из уравнения (6.1), имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{q_0}{m_0c^2} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) - \psi^* U \psi \right] \right\} + \\ + \nabla \cdot \left\{ \frac{q_0}{2m_0} \left[\psi^* \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \cdot \psi \right] \right\} = 0. \end{aligned}$$

Перепишем его в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{q_0}{m_0c^2} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) - \psi^* U_0 \psi \right] \right\} + \\ + \nabla \cdot \left\{ \frac{q_0}{2m_0} \left[\psi^* \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \psi - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \psi^* \cdot \psi \right] \right\} = \\ = \frac{q_0^2}{m_0c} \left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \varphi_e \psi) + \nabla \cdot (\psi^* \mathbf{A}_e \psi) \right]. \end{aligned}$$

Пусть атом взаимодействует с импульсом внешнего нестационарного электромагнитного поля, а моменты времени t_2 и t_1 являются моментами до и после окончания импульса соответственно. Проинтегрируем последнее уравнение по 4-объему $\Delta\Omega = V(t_2 - t_1)$, где $V \rightarrow \infty$, в результате получаем

$$q(t_2) - q(t_1) = \frac{q_0^2}{m_0 c^2} \int_{\Delta\Omega} \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\psi^* A_\mu^{(e)} \psi) d\Omega,$$

где

$$q(t) = \frac{q_0}{m_0 c^2} \int \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \right) - \psi^*(\mathbf{r}, t) U_0 \psi(\mathbf{r}, t) \right] dV.$$

Таким образом, если внешнее поле удовлетворяет условию

$$\int_{\Delta\Omega} \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\psi^* A_\mu^{(e)} \psi) d\Omega = 0, \tag{6.2}$$

т. е.

$$\int_V [\psi^*(\mathbf{r}, t_2) \varphi_e(\mathbf{r}, t_2) \psi(\mathbf{r}, t_2) - \psi^*(\mathbf{r}, t_1) \varphi_e(\mathbf{r}, t_1) \psi(\mathbf{r}, t_1)] dV + \oint_S \int_{t_1}^{t_2} \psi^* \mathbf{A}_e \psi dt d\mathbf{S} = 0,$$

то суммарный заряд мезоатома и частиц, возникших после взаимодействия мезоатома с электромагнитным полем, остается равным начальному заряду мезоатома. Поверхность S в последнем уравнении есть поверхность, ограничивающая объем V . Например, при захвате нейтральным атомом отрицательного мезона начальный заряд полной системы, состоящей из частицы и нейтрального атома, равен $-|e|$. Следовательно, суммарный заряд фрагментов реакции захвата, включающих ионы и вновь родившиеся частицы, возникшие в результате каскада радиационных переходов мезона в атоме и его последующего взаимодействия с ядром, по-прежнему остается равным $-|e|$. Рождение новых частиц в процессе захвата мезона нейтральным атомом возможно лишь в случае, когда происходят межзонные переходы между состояниями с различным знаком нормы волновой функции, т. е., как правило, между состояниями положительно частотного (n_1, l_1) и отрицательно частотного (n_2, l_2) спектров. Действительно, появление античастицы в состоянии с отрицательной нормой волновой функции при выполнении условия (6.2) с неизбежностью должно сопровождаться рождением частицы в состоянии с положительной нормой волно-

вой функции. Либо же при таком переходе рождаются нейтральные частицы, а атом становится отрицательно заряженным ионом. Нейтральные частицы, естественно, должны принадлежать непрерывному спектру состояний, что согласуется с формулами гл. 5. Действительно, энергии состояний дискретного спектра частицы и зеркальной частицы зависят от величины их углового момента l_1 (для частицы) и l_2 (для зеркальной частицы). Как видно из анализа, проведенного в разделе 5.3, в области существования стабильных атомов собственные значения энергии состояний частицы и зеркальной частицы оказываются различными (см. рис. 5.9). С другой стороны, собственные значения энергии состояний непрерывного спектра частицы и зеркальной частицы оказываются бесконечно вырожденными по величине углового момента l . Следовательно, в непрерывном спектре состояний заведомо существуют стационарные состояния с энергией E следующего вида:

$$\psi_{El}^{(0)} = A\psi_{El_1}^{(+)} + B\psi_{El_2}^{(-)},$$

которые отвечают нулевому значению нормы суперпозиционной волновой функции, т. е. состоянию нейтральной частицы, и являются суперпозицией волновых функций положительно и отрицательно частотных зон состояний, соответствующих одному и тому же значению энергии.

Как видно из вышеприведенных формул, изменение состояния частицы в атоме может происходить не только за счет процессов взаимодействия атома с поперечным электромагнитным полем. Действительно, если $\varphi(t_2) \neq \varphi(t_1)$, то для того чтобы полный заряд до и после взаимодействия остался неизменным, волновая функция частицы должна перестроиться таким образом, чтобы

$$\int \psi^*(\mathbf{r}, t_2)\varphi_e(\mathbf{r}, t_2)\psi(\mathbf{r}, t_2)dV = \int \psi^*(\mathbf{r}, t_1)\varphi_e(\mathbf{r}, t_1)\psi(\mathbf{r}, t_1)dV.$$

Если такой перестройки не происходит, то мы будем иметь дело с процессами, при которых полный заряд не сохраняется.

Следует отметить, что процессы с сохранением заряда не являются единственно возможными процессами в природе. Действительно, как мы отмечали выше, при рассмотрении явлений космологического масштаба нет априорных оснований полагать, что потенциал $\varphi(\mathbf{r}, t)$ является одинаковым во всех точках Вселенной. Наличие макроскопических скоплений одинаково заряженных частиц может приводить к скачкам потенциала, превышающим массу покоя частицы. Это приводит к рождению зеркальных частиц в скрытом для наблюдателя секторе пространства. Нейтральный мезоатом, имея ненулевую скорость движения, может легко перейти из области нулевого значения статического потенциала в область произвольного его значения, поскольку, будучи нейтральным, он не чувствует скачков потенциала (по крайней мере в нулевом приближении). Однако, как следует из вышеприведенных формул, этот переход неизбежно должен сопровождаться изменением внутренней структуры самого атома, поскольку

ку в этом случае $\varphi_e(t_2) \neq \varphi_e(t_1)$. Естественно, такая интерпретация справедлива лишь в рамках предположения о неизменности величины скачка потенциала, что выполняется, например, когда одиночный мезоатом проходит сквозь область скачка потенциала, создаваемую макроскопическим распределением зарядов. В рамках самосогласованной модели, учитывающей изменение заряда в той области пространства, где оказался мезоатом, указанное явление может быть снова приведено в соответствие с законом сохранения полного заряда во Вселенной. Однако такая теория должна быть заведомо многочастичной.

Результаты приведенного выше обсуждения показывают, что наличие базиса связанных состояний зеркальной частицы в кулоновском поле качественно изменяет характер процессов взаимодействия атома с электромагнитным полем. Если переходы между состояниями стандартного базиса состояний частицы в кулоновском поле относятся к области явлений атомной физики, то процессы, связанные с переходами между состояниями базиса частицы и зеркальной частицы, неизбежно приводят к изменению состояния не только рассматриваемой частицы, но и ядра атома. Следовательно, процессы, затрагивающие состояния зеркальных частиц, относятся к области ядерной физики и физики элементарных частиц.

6.1.2. Уравнения для амплитуд населенности уровней. Начнем с рассмотрения процессов взаимодействия атома с внешним электромагнитным полем, удовлетворяющих условию (6.2). Пусть нам известны собственные волновые функции и собственные значения краевой задачи для свободного атома, т. е. атома, не взаимодействующего с внешним электромагнитным полем. Эти волновые функции имеют вид

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = u_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

и удовлетворяют уравнению

$$\frac{1}{2m_0c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0(\mathbf{r}) \right)^2 \psi_n = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi_n, \quad (6.3)$$

где $U_0(\mathbf{r}) = q_0\varphi_0(\mathbf{r})$. Квантовое число n есть совокупность четырех квантовых чисел $n = (\mathbf{n}, \lambda)$, где квантовое число \mathbf{n} является совокупностью трех пространственных квантовых чисел $\mathbf{n} = (n, l, m)$, которыми в случае частицы, взаимодействующей с кулоновским полем, являются радиальное квантовое число n , угловой момент l и его проекция m .

Умножая обе части уравнения (6.1) на ψ_n^* , а обе части уравнения, комплексно сопряженного с (6.3), — на ψ и беря разность получившихся выражений, после несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} & \frac{i\hbar}{m_0c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi_n^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi_n^*}{\partial t} \psi \right) - \psi_n^* U_0 \psi \right] = \\ & = -i\hbar \operatorname{div} \mathbf{j}_n - \frac{q_0}{m_0c} \psi_n^* A_\mu^{(e)} \left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu^{(0)} \right) \psi + \frac{q_0^2}{2m_0c^2} \psi_n^* A_\mu^{(e)2} \psi, \quad (6.4) \end{aligned}$$

где

$$\mathbf{j}_n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla\psi_n^* \cdot \psi - \psi_n^* \cdot \nabla\psi) - \frac{q_0}{c} \psi_n^* \mathbf{A}_0 \psi \right].$$

Разложим общее решение нестационарной задачи (6.1) в ряд по собственным волновым функциям краевой задачи (6.3):

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \sum_n a_n u_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right), \\ i\hbar \frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \sum_n E_n a_n u_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right). \end{aligned} \quad (6.5)$$

Подставляя (6.5) в (6.4) и интегрируя по объему, получаем

$$i\hbar C_n \frac{da_n}{dt} = \sum_m V_{nm} a_m, \quad (6.6)$$

где

$$V_{nm} = -\frac{1}{c} \int \psi_n^* \left[A_\mu^{(e)} \frac{q_0}{m_0} \left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu^{(0)} \right) - \frac{q_0^2}{2m_0c} A_\mu^{(e)} A_\mu^{(e)} \right] \psi_m dV, \quad (6.7)$$

а коэффициенты C_n определяют знак нормы волновой функции и имеют вид

$$C_n = \frac{1}{m_0c^2} \int \psi_n^*(\mathbf{r}) (E_n - U_0(\mathbf{r})) \psi_n(\mathbf{r}) dV. \quad (6.8)$$

При выводе (6.6) мы положили, что $\int \operatorname{div} \mathbf{j}_{nm} dV = \oint \mathbf{j}_{nm} d\mathbf{S} = 0$.

Из системы уравнений (6.6) получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n C_n |a_n|^2 = \sum_{n,m} (V_{nm} - V_{mn}^*) a_n^* a_m.$$

Следовательно, если матричные элементы V_{nm} удовлетворяют соотношениям $V_{nm} = V_{mn}^*$, то величина $\sum_n C_n |a_n(t)|^2$ является интегралом движения уравнений (6.6). Как видно, матричные элементы (6.7) указанным свойством не обладают. Однако при выполнении условия (6.2) матричные элементы V_{nm} можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} V_{nm} = -\frac{1}{c} \int \left\{ A_\mu^{(e)} \frac{q_0}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial\psi_n^*}{\partial x_\mu} \psi_m - \psi_n^* \frac{\partial\psi_m}{\partial x_\mu} \right) - \frac{q_0}{c} \psi_n^* A_\mu^{(0)} \psi_m \right] - \right. \\ \left. - \frac{q_0^2}{2m_0c} \psi_n^* A_\mu^{(e)} A_\mu^{(e)} \psi_m \right\} dV + \frac{i\hbar q_0}{m_0c} \int \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\psi_n^* A_\mu^{(e)} \psi_m) dV. \end{aligned}$$

Следовательно, при выполнении условия

$$\int \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\psi_n^* A_\mu^{(e)} \psi_m) dV = 0 \quad (6.9)$$

матричные элементы V_{nm} принимают вид

$$V_{nm} = -\frac{1}{c} \int \left[A_{\mu}^{(e)} j_{nm, \mu} - \frac{q_0^2}{2m_0 c} \psi_n^* A_{\mu}^{(e)} A_{\mu}^{(e)} \psi_m \right] dV, \quad (6.10)$$

где пространственная и временная компоненты 4-вектора $j_{nm, \mu} = (\mathbf{j}_{nm}, ic\rho_{nm})$ определяются выражениями

$$\mathbf{j}_{nm} = \frac{q_0}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \psi_n^* \cdot \psi_m - \psi_n^* \nabla \psi_m) - \frac{q_0}{c} \psi_n^* \mathbf{A}_0 \psi_m \right], \quad (6.11a)$$

$$\rho_{nm} = \frac{q_0}{m_0 c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \psi_n^*}{\partial t} \cdot \psi_m - \psi_n^* \frac{\partial \psi_m}{\partial t} \right) - \psi_n^* U_0 \psi_m \right]. \quad (6.11b)$$

Несложно видеть, что компоненты указанного 4-вектора подчиняются следующим соотношениям:

$$\mathbf{j}_{mn}^* = \mathbf{j}_{nm}, \quad \rho_{mn}^* = \rho_{nm}.$$

Следовательно, матричные элементы (6.7) при выполнении условия (6.9) обладают следующими симметричными свойствами:

$$V_{nm} = V_{mn}^*.$$

Отметим, что условие (6.9) в общем случае отличается от условия (6.2).

Как мы видели в гл. 5, все собственные волновые функции положительно частотного спектра имеют положительную норму. Нормы собственных волновых функций отрицательно частотного спектра зависят от знака $\Gamma(n_2 - 2s_{t_2})$, поэтому удобно ввести следующие обозначения:

$$a_{\mathbf{n}}^{(\lambda)} = \begin{cases} a_{\mathbf{n}}^{(\lambda)}, & C_{\mathbf{n}}^{(\lambda)} = +1, \\ b_{\mathbf{n}}^{(-)}, & C_{\mathbf{n}}^{(-)} = -1, \end{cases}$$

где коэффициенты $C_{\mathbf{n}}^{(\lambda)} = C_{\mathbf{n}}$ определяются выражением (6.8). Используя указанные выше симметричные свойства матричных элементов V_{nm} , путем несложных преобразований из (6.5) и (6.6) получаем следующие соотношения:

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{\mathbf{n}, \lambda} |a_{\mathbf{n}}^{(\lambda)}|^2 - \sum_{\mathbf{n}'} |b_{\mathbf{n}'}^{(-)}|^2 \right) = 0, \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_{\mathbf{n}, \lambda} |a_{\mathbf{n}}^{(\lambda)}|^2 + \sum_{\mathbf{n}'} |b_{\mathbf{n}'}^{(-)}|^2 \right) = \\ = 2 \sum_{\mathbf{n}'} \sum_{\mathbf{m}, \lambda} \left(V_{\mathbf{m}\mathbf{n}'}^{(\lambda, -)} a_{\mathbf{m}}^{(\lambda)*} b_{\mathbf{n}'}^{(-)} - V_{\mathbf{m}\mathbf{n}'}^{(\lambda, -)*} b_{\mathbf{n}'}^{(-)*} a_{\mathbf{m}}^{(\lambda)} \right). \end{aligned} \quad (6.13)$$

Равенство (6.12) определяет закон сохранения заряда и совпадает с выражением (4.63) в случае, когда всем состояниям отрицательно частотной зоны состояний отвечают волновые функции с отрицательной

нормой. Соотношение (6.13) показывает, что суммарное число частиц и зеркальных частиц может изменяться в процессе взаимодействия мезоатома с электромагнитным полем только тогда, когда совершаются переходы между состояниями с различным знаком нормы собственных волновых функций.

Отметим в заключение, что система уравнений (6.6) получена в результате разложения волновой функции нестационарной задачи (6.1) по волновым функциям свободного атома. Такое разложение удобно при анализе задач о взаимодействии мезоатома с внешней электромагнитной волной, напряженность поля которой много меньше внутриатомной, поскольку симметричные свойства уравнения (6.1) в этом случае незначительно отличаются от сферической симметрии свободного атома. В главах, посвященных теории частиц с полужелым спином, мы покажем, что при взаимодействии атома с лазерными полями околоатомной напряженности более эффективным методом является разложение волновой функции по собственным волновым функциям краевой задачи для атома во внешнем поле.

6.1.3. Векторы электрической и магнитной поляризации.

Остановимся на анализе взаимодействия атома с внешним поперечным электромагнитным полем, т.е. положим, что $\varphi_e = 0$. Пренебрегая в (6.10) слагаемым, квадратичным по амплитуде внешнего поля, мы видим, что характер взаимодействия атома с внешним поперечным электромагнитным полем определяется матричными элементами

$$\mathbf{j}_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} = \frac{q_0}{2m_0} \left[\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right].$$

В качестве базовой модели атома обычно рассматривается задача о движении частицы в кулоновском поле. В этом случае $\mathbf{A}_0 = 0$, а пространственная часть собственных волновых функций имеет вид

$$f_{\mathbf{n}}^{(\lambda)}(\mathbf{r}) = R_{nl}^{(\lambda)}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

где квантовое число \mathbf{n} является совокупностью трех квантовых чисел $\mathbf{n} = (n, l, m)$ — радиального квантового числа n , углового момента l и его проекции m .

Матричные элементы (6.11а) удобно связать с матричными элементами операторов координаты и углового момента, поскольку угловая часть матричных элементов указанных операторов рассчитывается гораздо проще, чем угловая часть матричных элементов (6.11а). Для определения интересующей нас связи обратимся к уравнениям для волновых функций (6.3):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0(\mathbf{r}) \right)^2 \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (6.14)$$

Умножая уравнение (6.14) слева на $\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*}$, а уравнение для волновой функции $\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*}$ справа на $\psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}$ и вычитая затем получившиеся соотношения, получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{q_0}{m_0 c^2} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \frac{\partial \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}}{\partial t} - \frac{\partial \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*}}{\partial t} \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right) - \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} U_0 \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right] \right\} = \\ = -\nabla \left\{ \frac{q_0}{2m_0} \left[\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right] \right\}. \quad (6.15) \end{aligned}$$

Полученное соотношение показывает, что 4-вектор $j_{nm,\mu}$, компоненты которого определяются выражениями (6.11а, б), удовлетворяет уравнению непрерывности.

Учтем, что матричные элементы $V_{\mathbf{nm}}^{(\lambda\lambda')}$ включают произведение $\mathbf{A}_e \mathbf{p}$, поэтому умножим обе части равенства (6.15) на $x_i = (\mathbf{e}_i \mathbf{r})$ и воспользуемся следующим соотношением векторной алгебры:

$$(\mathbf{e} \mathbf{r}) \operatorname{div} \mathbf{j} = \mathbf{e} \operatorname{rot} [\mathbf{r} \mathbf{j}] + \operatorname{div} (\mathbf{r} (\mathbf{e} \mathbf{j})) - (\mathbf{e} \mathbf{j}).$$

Тогда из (6.15) получаем

$$\mathbf{e}_i \mathbf{j}_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} = \mathbf{e}_i \left[\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} \rho_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')}) + \operatorname{rot} [\mathbf{r} \mathbf{j}_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')}] \right] + \operatorname{div} (\mathbf{r} (\mathbf{e}_i \mathbf{j}_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')})), \quad (6.16)$$

где

$$\rho_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} = \frac{q_0}{m_0 c^2} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \frac{\partial \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')}}{\partial t} - \frac{\partial \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*}}{\partial t} \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right) - \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} U_0 \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right].$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{r} \rho_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} = \frac{q_0}{2m_0 c} \left[\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \frac{\mathbf{r}}{c} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right) \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} + \right. \\ \left. + \frac{\mathbf{r}}{c} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right) \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right], \quad (6.17) \end{aligned}$$

$$\mathbf{M}_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} [\mathbf{r} \mathbf{j}_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')}] = \frac{q_0 \hbar}{2m_0 c} \left(\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \mathbf{L} \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} + \mathbf{L}^+ \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right), \quad (6.18)$$

где

$$\hbar \mathbf{L} = \left[\mathbf{r} \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \right].$$

Оператор \mathbf{L} является оператором обобщенного углового момента. Действительно, как несложно видеть, в случае когда векторный потенциал внутриатомного поля равен нулю, $\mathbf{A}_0 = 0$, оператор \mathbf{L} совпадает с оператором углового момента \mathbf{l} . Отклик материального поля на воздействие электромагнитных волн характеризуется векторами электрической и магнитной поляризации. Учитывая вид оператора $\mathbf{k} = -i \left(\frac{\mathbf{r}}{c} \frac{\partial}{\partial t} + ct \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)$, несложно видеть, что природа магнитной поляризации связана с пространственно-пространственными вращениями материального поля, а природа электрической поляризации с пространственно-временными вращениями, т. е. ускоренным движением частиц.

Используя вышеприведенные преобразования, например, получаем

$$\int \mathbf{j}_{nm}^{(\lambda, \lambda')} dV = \frac{d}{dt} \int \mathbf{P}_{nm}^{(\lambda, \lambda')} dV + c \int \text{rot } \mathbf{M}_{nm}^{(\lambda, \lambda')} dV. \quad (6.19)$$

Несложно видеть, что соотношение (6.19) полностью аналогично соотношению классической электродинамики $\mathbf{j} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + c \text{rot } \mathbf{M}$, определяющему связь плотности тока \mathbf{j} с векторами электрической \mathbf{P} и магнитной \mathbf{M} поляризации. Таким образом, соотношение (6.19) позволяет связать матричные элементы плотности тока перехода с матричными элементами вектора электрической поляризации \mathbf{P} и магнитной поляризации \mathbf{M} .¹⁾

В длинноволновом приближении, когда длина волны излучения существенно превышает размеры атомных оболочек, можно положить

$$\mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_e(t).$$

В этом случае первое слагаемое в правой части выражения (6.10) принимает вид

$$V_{nm}^{(1)} = -\frac{1}{c} \mathbf{A}_e(t) \int \mathbf{j}_{nm}(\mathbf{r}, t) dV,$$

и для его расчета можно непосредственно воспользоваться соотношением (6.19).

При выводе соотношения (6.19) мы полагали, что интеграл от последнего слагаемого в (6.16) обращается в нуль, поскольку волновая функция стремится к нулю при $r \rightarrow \infty$. Однако в общем случае матричные элементы $V_{nm}^{(1)}$ являются суммой трех слагаемых:

$$V_{nm}^{(1)} = -\frac{1}{c} \int \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \mathbf{P}_{nm}}{\partial t} dV - \int \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) \text{rot } \mathbf{M}_{nm} dV - \frac{1}{c} \sum_{i=1}^3 \int (\mathbf{e}_i \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t)) \text{div}(\mathbf{r}(\mathbf{e}_i \mathbf{j}_{nm})) dV. \quad (6.20)$$

¹⁾ Отметим важное для дальнейшего изложения обстоятельство, состоящее в том, что в обоих выражениях, (6.17) и (6.18), можно выделить общий множитель

$$\mu_0 = \frac{q_0 \hbar}{2m_0 c}.$$

В случае когда масса частицы совпадает с массой электрона, магнетон μ_0 становится равным магнетону Бора. Магнетон μ_0 явно фигурирует в формуле (6.18) в качестве коэффициента связи между матричными элементами оператора магнитного момента \mathbf{M} и оператора обобщенного углового момента \mathbf{L} . Как видно из формулы (6.17), магнетон μ_0 является также коэффициентом связи матричных элементов оператора электрической поляризации \mathbf{P} и оператора $\mathbf{r}(i\partial/\partial t - U_0/\hbar)$, квантово-механическое среднее от которого, как было показано в гл. 3, пропорционально величине электрического дипольного момента частицы. Отметим, что вышесказанное не означает, конечно же, что векторы \mathbf{P} и \mathbf{M} всегда имеют одинаковую величину, поскольку для состояний стандартного базиса $|\langle \mathbf{P} \rangle| \approx q_0 a_0 = 2\mu_0/\alpha$, в то время как $|\langle \mathbf{M} \rangle| \approx \mu_0$.

Три слагаемых в выражении (6.20) могут быть преобразованы следующим образом.

Первое слагаемое преобразуется к виду

$$\begin{aligned} V_{nm}^{(e)} &= -\frac{1}{c} \int \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \mathbf{P}_{nm}}{\partial t} dV = \\ &= - \int \mathbf{E}_e \mathbf{P}_{nm} dV - \frac{1}{c} \frac{d}{dt} \int \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) \mathbf{P}_{nm}(\mathbf{r}, t) dV, \quad (6.21) \end{aligned}$$

где напряженность электрического поля поперечной электромагнитной волны определяется хорошо известным выражением

$$\mathbf{E}_e(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

Первое слагаемое в (6.21) имеет хорошо известный вид и описывает взаимодействие вектора электрической поляризации атома с вектором напряженности электрического поля внешней волны. Второе слагаемое обращается в нуль в случае взаимодействия атома с резонансным электромагнитным излучением, когда частота поля ω совпадает с частотой атомного перехода:

$$\omega \approx \omega_{nm}.$$

Однако в общем случае этим слагаемым пренебрегать нельзя, поскольку вклад этого слагаемого не является малым. Как видно, оба слагаемых в (6.21) не равны нулю и в длинноволновом приближении, когда первое слагаемое принимает вид гамильтониана электродипольного взаимодействия:

$$V_{nm}^{(ED)} = -\mathbf{E}_e(t) \int \mathbf{P}_{nm}(\mathbf{r}, t) dV = -\mathbf{E}_e(t) \mathbf{d}_{nm}(t).$$

Для преобразования второго слагаемого в (6.20) воспользуемся следующей формулой векторной алгебры:

$$\operatorname{div} [\mathbf{A}\mathbf{M}] = \mathbf{A} \operatorname{rot} \mathbf{M} - \mathbf{M} \operatorname{rot} \mathbf{A}.$$

Тогда, учитывая, что интеграл от дивергенции обращается в нуль, получаем

$$V_{nm}^{(m)} = - \int \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t) \operatorname{rot} \mathbf{M}_{nm} dV = - \int \mathbf{B}_e(\mathbf{r}, t) \mathbf{M}_{nm} dV, \quad (6.22)$$

где \mathbf{B}_e — вектор напряженности магнитного поля (более точно, это вектор индукции магнитного поля, однако, поскольку мы рассматриваем задачу о взаимодействии одиночного атома, находящегося в вакууме, эти две величины совпадают), определяющийся хорошо известным выражением

$$\mathbf{B}_e(\mathbf{r}, t) = \operatorname{rot} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}, t).$$

Таким образом, второе слагаемое в (6.20) также преобразуется к хорошо известному виду и описывает взаимодействие вектора маг-

нитной поляризации атома с вектором напряженности магнитного поля внешней волны. В магнитном длинноволновом приближении $\mathbf{B}_e(\mathbf{r}, t) \approx \mathbf{B}_e(t)$ это слагаемое принимает вид гамильтониана магнитодипольного взаимодействия:

$$V_{nm}^{(MD)} = -\mathbf{B}_e(t) \int \mathbf{M}_{nm}(\mathbf{r}, t) dV = -\mathbf{B}_e(t) \mathbf{m}_{nm}(t).$$

Третье слагаемое в (6.20) можно преобразовать к виду

$$V_{nm}^{(r)} = -\frac{1}{c} \int \mathbf{r} (\mathbf{e}_i \mathbf{j}_{nm}) \nabla (\mathbf{e}_i \mathbf{A}_e) dV.$$

Полагая $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(\mathbf{p}) f(\mathbf{kr} - \omega t)$, где $\mathbf{A}_0(\mathbf{p})$ — профиль пучка в плоскости, перпендикулярной вектору \mathbf{k} , получаем: $\nabla(\mathbf{e}_i \mathbf{A}) \approx \mathbf{k}(\mathbf{e}_i \mathbf{A}_0) f'$, т.е. атом взаимодействует с продольной компонентой поля. Это слагаемое учитывает эффекты пространственной дисперсии и приводит к появлению поправок, имеющих величину порядка $ka_0 A_e j_{nm} = 2\pi(a_0/\lambda) A_e j_{nm}$, т.е. пропорциональных отношению радиуса атомных оболочек a_0 к длине волны λ . В случае $a_0 \ll \lambda$ этими поправками можно пренебречь.

6.1.4. Релятивистски инвариантные соотношения. Соотношение (6.16) имеет общий характер, поскольку при его выводе мы не использовали никаких приближений или предположений. Однако оно является частным случаем более общих соотношений. Действительно, запишем уравнение (6.15) в виде

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(j_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} \right)_\mu = 0, \quad (6.23)$$

где

$$\left(j_{\mathbf{nm}}^{(\lambda, \lambda')} \right)_\mu = \frac{q_0}{2m_0} \left[\psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu^{(0)} \right) \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} - \left(p_\mu + \frac{q_0}{c} A_\mu^{(0)} \right) \psi_{\mathbf{n}}^{(\lambda)*} \cdot \psi_{\mathbf{m}}^{(\lambda')} \right].$$

Пользуясь (6.23), получаем

$$j_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\nu} (x_\mu j_\nu - x_\nu j_\mu) + \frac{\partial}{\partial x_\nu} (x_\nu j_\mu), \quad (6.24)$$

где мы опустили для краткости индексы у j_{nm} . Соотношение (6.24) позволяет связать матричные элементы оператора

$$p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu$$

с матричными элементами антисимметричного 4-тензора

$$J_{\mu\nu} = x_\mu \left(p_\nu - \frac{q_0}{c} A_\nu^{(0)} \right) - x_\nu \left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu^{(0)} \right). \quad (6.25)$$

Как мы отмечали ранее, при $A_\mu^{(0)} = 0$ тензор (6.25) осуществляет представление группы трех- и четырехмерных вращений. Его простран-

ственные компоненты являются компонентами оператора обобщенного углового момента частицы, находящейся во внешнем поле:

$$\hbar \mathbf{L} = \left[\mathbf{r} \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) \right],$$

а пространственно-временные компоненты являются компонентами обобщенного оператора \mathbf{k} :

$$\hbar \mathbf{K} = -i \left[ct \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) - \mathbf{r} \frac{1}{c} \left(i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right) \right]. \quad (6.26)$$

В случае свободной частицы оператор \mathbf{K} совпадает с оператором \mathbf{k} , являющимся генератором пространственно-временных преобразований скалярной волновой функции при преобразованиях Лоренца. В гл. 3 мы уже отмечали, что оператор \mathbf{k} связан с оператором электрического дипольного момента частицы. Полученные формулы дают дополнительные подтверждения в пользу такой интерпретации физического смысла оператора \mathbf{k} .

Отметим в заключение следующее обстоятельство. С учетом вида оператора \mathbf{K} , определяемого соотношением (6.26), на первый взгляд может показаться, что правая часть соотношения (6.24) по-прежнему включает матричные элементы оператора $\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0$. Однако выписав отдельно пространственную часть релятивистски инвариантного соотношения (6.24), можно увидеть, что указанные слагаемые взаимно сокращаются и оставшаяся формула принимает вид (6.16). Поэтому в практических расчетах удобнее пользоваться непосредственно формулой (6.16), несмотря на то что она не имеет релятивистски инвариантного вида.

6.2. Спонтанный распад

Как мы уже отмечали выше, π^- -мезон, захваченный атомом, совершает каскад радиационных переходов, стремясь занять основное состояние мезоатома. Соотношение интенсивности линий рентгеновского излучения, испускаемого в процессе указанного каскадного распада, определяется вероятностью спонтанных переходов.

Спонтанные радиационные переходы мезона в атоме обусловлены его взаимодействием с равновесным излучением, создаваемым окружающей средой. Скорость спонтанных переходов зависит от того, находится ли атом в свободном пространстве или же он находится в объеме, ограниченном отражающими стенками. Отличия обусловлены тем, что равновесное излучение в свободном пространстве обладает изотропией и однородностью, в то время как в присутствии отражающих стенок свойства равновесного излучения начинают зависеть от геометрии объема и величины коэффициента отражения ограничивающих стенок. Указанные отличия существенны, если частота излучения лежит в видимом и более низкочастотном диапазонах длин волн и если

атом находится на расстоянии порядка длины волны излучения от отражающих поверхностей. В случае излучения рентгеновского и более высокочастотного диапазонов длин волн эти отличия, как правило, не проявляются, поскольку диэлектрическая проницаемость в рентгеновском диапазоне незначительно отличается от единицы, что приводит к малости коэффициента отражения.

6.2.1. Равновесное излучение. Отметим, что под скоростью спонтанного распада обычно понимается скорость радиационных переходов электрона или мезона в атоме, находящемся в свободном пространстве, т. е. в атоме, достаточно далеко находящемся от окружения. Однако эта модель является весьма ограниченной. Действительно, любое движение заряженных частиц окружающей нас материи приводит к ненулевому значению напряженности поля в любой точке пространства, которая связана с положением заряда времени — подобным интервалом. Поэтому идеализированная модель свободного пространства вряд ли адекватно описывает реальную ситуацию.

Потенциал электромагнитного поля, создаваемого средой, определяется выражением

$$\Delta A_\mu - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A_\mu}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} j_\mu,$$

где 4-вектор плотности тока $j_\mu(x)$ определяется движением всех зарядов в окружающем пространстве:

$$j_\mu(x) = \sum_i j_\mu^{(i)}(x).$$

Разобьем окружающую среду на макроскопические объемы $V(\mathbf{R})$, положение центров которых определяется радиусом-вектором \mathbf{R} . Тогда поле, создаваемое частицами макроскопического объема $V(\mathbf{R}_0)$ в точке наблюдения \mathbf{r} , находящейся в дальней зоне, определяется хорошо известным выражением

$$A_\mu(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{cR_0} \int j_\mu \left(\mathbf{r}', t - \frac{R_0}{c} + \frac{\mathbf{nr}'}{c} \right) dV'.$$

Сумму по зарядам удобно представить в виде суммы по зарядам нейтральных комплексов (атомов, молекул и т. п.) и суммы по положениям нейтральных комплексов. Тогда статистические средние векторного и скалярного потенциалов в точке наблюдения определяются выражениями

$$\langle A_\mu(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{cR_0} \sum_{j \in V(\mathbf{R}_0)} \int \left\langle J_\mu^{(j)} \left(\mathbf{r}', t - \frac{R_0}{c} + \frac{\mathbf{nr}'}{c} \right) \right\rangle dV',$$

где

$$J_\mu^{(j)}(x) = \sum_a j_\mu^{(a)}(x),$$

сумма по j есть сумма по нейтральным комплексам в объеме $V(\mathbf{R}_0)$, а сумма по a — сумма по зарядам внутри нейтрального комплекса. Угловые скобки означают статистическое усреднение. Учитывая электрическую нейтральность окружающей среды и тепловое движение частиц, получаем

$$\langle A_\mu(\mathbf{r}, t) \rangle = 0.$$

С другой стороны, полагая, что отдельные нейтральные комплексы окружающей среды статистически независимы, получаем

$$\begin{aligned} \langle A_\mu(\mathbf{r}, t) A_\mu(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{c^2 R_0^2} \sum_{j \in V(\mathbf{R}_0)} \iint \left\langle J_\mu^{(j)} \left(\mathbf{r}', t - \frac{R_0}{c} + \frac{\mathbf{nr}'}{c} \right) \times \right. \\ \left. \times J_\mu^{(j)} \left(\mathbf{r}'', t - \frac{R_0}{c} + \frac{\mathbf{nr}''}{c} \right) \right\rangle dV' dV''. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Статистические средние в правой части отличны от нуля и зависят от температуры окружающей среды. Отметим, что при рассмотрении задач о взаимодействии атома с когерентным внешним полем часть атомов окружающей среды может находиться в коррелированном состоянии. Однако, учитывая, что в реальной ситуации вклад этой части в амплитуду равновесного поля в точке наблюдения всегда ничтожно мал по сравнению со вкладом всей оставшейся среды, мы заведомо можем им пренебречь. Таким образом, каждая из компонент 4-потенциала поля равновесного излучения характеризуется в точке наблюдения равным нулю средним и не равной нулю дисперсией.

Выделим макроскопический объем $V = L_1 L_2 L_3$ свободного пространства. Учитывая, что равновесное поле однородно распределено в пространстве, мы можем положить, что поле удовлетворяет периодическим граничным условиям. Например:

$$A_\mu(x=0, y, z, t) = A_\mu(x=L_1, y, z, t),$$

тогда потенциалы поля, представленные в виде разложения по собственным модам объема V , принимают вид

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \left[\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}} t - \mathbf{k}\mathbf{r})] + \right. \\ \left. + \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(t) \exp[i(\omega_{\mathbf{k}} t - \mathbf{k}\mathbf{r})] \right], \end{aligned} \quad (6.28a)$$

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \left[\varphi_{\mathbf{k}} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}} t - \mathbf{k}\mathbf{r})] + \right. \\ \left. + \varphi_{\mathbf{k}}^*(t) \exp[i(\omega_{\mathbf{k}} t - \mathbf{k}\mathbf{r})] \right], \end{aligned} \quad (6.28б)$$

где

$$\mathbf{k} = \mathbf{e}_1 \frac{2\pi n_1}{L_1} + \mathbf{e}_2 \frac{2\pi n_2}{L_2} + \mathbf{e}_3 \frac{2\pi n_3}{L_3}$$

и n_i — целые числа. Для каждого направления вектора \mathbf{k} мы можем выбрать три вектора поляризации, такие что $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(1,2)} \mathbf{k} = 0$ и $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(3)} \mathbf{k} = |\mathbf{k}|$. В выражения (6.28) входит величина объема V . Однако на размеры объема мы никаких ограничений не накладывали, поэтому мы можем устремить величину объема к бесконечности. Тогда, учитывая, что $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}$, в конечных расчетах величина объема пропадает.

Для векторов напряженности электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{B} полей получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}V}} & \left[i\omega_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] - \right. \\ & \left. - i\omega_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] \right] - \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}V}} \left[i\mathbf{k}\varphi_{\mathbf{k}} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] - \right. \\ & \left. - i\mathbf{k}\varphi_{\mathbf{k}} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] \right], \end{aligned} \quad (6.29)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}V}} & \left[i \left[\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right] A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] - \right. \\ & \left. - i \left[\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \right] A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] \right]. \end{aligned}$$

Плотность энергии электромагнитного поля, как известно, определяется выражением

$$w = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2).$$

Для энергии поля в объеме V , используя вышеприведенные выражения для \mathbf{E} и \mathbf{B} , получаем

$$\begin{aligned} W = \int_V dV w(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \alpha=1,2} \hbar\omega_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(A_{\mathbf{k}}^{(3)*} A_{\mathbf{k}}^{(3)} + \varphi_{\mathbf{k}}^* \varphi_{\mathbf{k}} \right). \end{aligned} \quad (6.30)$$

Свободное электромагнитное поле удовлетворяет условию лоренцевской калибровки

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0.$$

Полагая, что каждая из плосковолновых компонент поля (6.28) удовлетворяет условию лоренцевской калибровки, получаем

$$\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{c} \varphi_{\mathbf{k}} - \mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(3)} A_{\mathbf{k}}^{(3)} = 0. \quad (6.31)$$

Продольная компонента вектора напряженности электрического поля (6.29) при условии (6.31) обращается в нуль. Таким образом, усло-

вие (6.31) выделяет поперечную компоненту электромагнитного поля. В этом случае выражение (6.30) принимает вид

$$W = \sum_{\mathbf{k}, \alpha=1,2} \hbar \omega_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}.$$

Как видно, нормировка, принятая в разложении (6.28), соответствует тому, что амплитуды $A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ являются безразмерными амплитудами векторного потенциала и имеют простой физический смысл, а именно: квадрат модуля амплитуды $|A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}|^2$ определяет число квантов в (\mathbf{k}, α) моде поля. При этом нормировочный множитель

$$a_0(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}}$$

определяет амплитуду одноквантового поля, т.е. амплитуду потенциала электромагнитного поля в (\mathbf{k}, α) моде в случае, когда число заполнения этой моды равно единице: $|A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}|^2 = 1$.

Отметим, что выражения (6.28) являются решениями однородного уравнения для 4-потенциала поля. При учете наличия среды уравнение для 4-потенциала становится неоднородным. Естественно, при этом становится ненулевой и поперечная компонента поля. Решения (6.28) можно использовать в качестве базиса разложения решений неоднородного уравнения. Однако прежде чем переходить к этому, удобно придать разложениям (6.28)–(6.30) более симметричный вид. Действительно, поперечное электромагнитное поле связано лишь с двумя ортогональными модами объема V :

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}).$$

Условие ортогональности имеет вид

$$\int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(\mathbf{r}) \mathbf{u}_{\mathbf{k}'}^{(\beta)} dV = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Введем ортогональные векторы четырехмерной поляризации $e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)}$ в системе отсчета, связанной с направлением волнового вектора каждой из плосковолновых компонент. Полагая, что волновой вектор направлен вдоль оси z , эти векторы можно выбрать в следующем виде:

$$\begin{aligned} e_{\mathbf{k}\mu}^{(1)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, 0 \right), & e_{\mathbf{k}\mu}^{(2)} &= \left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0 \right), \\ e_{\mathbf{k}\mu}^{(3)} &= (0, 0, 1, 0), & e_{\mathbf{k}\mu}^{(4)} &= (0, 0, 0, i). \end{aligned}$$

Несложно видеть, что 4-векторы $e_{\mu}^{(\nu)}$ обладают следующими свойствами:

$$e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)} e_{\mathbf{k}\mu'}^{(\nu')} = \delta_{\nu\nu'}, \quad e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)} e_{\mathbf{k}\sigma}^{(\nu)} = \delta_{\mu\sigma}, \quad e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)} k_{\mathbf{k}\mu} = 0,$$

где 4-вектор k_μ в выбранной системе отсчета имеет вид: $k_{\mathbf{k}\mu} = (0, 0, \frac{\omega}{c}, i\frac{\omega}{c})$. Как видно, 4-векторы $e^{(1,2)}$ соответствуют поперечному, $e^{(3)}$ — продольному, а $e^{(4)}$ — скалярному состоянию поляризации равновесного поля.¹⁾ В этом случае разложения (6.28а–б) можно записать в едином виде

$$A_\mu(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\nu} \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}V}} \left[e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)} A_{\mathbf{k}}^{(\nu)}(t) \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] + e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)*} A_{\mathbf{k}}^{(\nu)*}(t) \exp[i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k}\mathbf{r})] \right], \quad (6.32)$$

где $A_{\mathbf{k}}^{(4)} = \varphi_{\mathbf{k}}$. Выражение для энергии поля в объеме V принимает теперь симметричный вид

$$W = \sum_{\mathbf{k}\nu} \hbar\omega_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^{(\nu)*}(t) A_{\mathbf{k}}^{(\nu)}(t). \quad (6.33)$$

Формула (6.33) была получена на основе ортогональности собственных функций:

$$u_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}).$$

Вместе с тем к аналогичному выражению можно прийти, если учесть статистические свойства движения зарядов окружающей среды, создающей равновесное излучение. Отметим, что, в отличие от случая свободного поля, коэффициенты разложения в (6.32) являются функциями времени. Эта временная зависимость обусловлена движением зарядов окружающей среды и имеет вид

$$A_{\mathbf{k}}^{(\nu)}(t) = A_{\mathbf{k}0}^{(\nu)} + i\sqrt{\frac{\pi V}{\hbar\omega}} \int_{-\infty}^t e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)*} j_\mu(\mathbf{k}, t') \exp(i\omega_{\mathbf{k}}t') dt', \quad (6.34)$$

первое слагаемое $A_{\mathbf{k}0}^{(\nu)}$ есть потенциал свободного поля, которое, как мы видели выше, является поперечным, а второе слагаемое связано с движением зарядов окружающей среды:

$$j_\mu(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{V} \int_V j_\mu(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) dV.$$

¹⁾ Отметим, что векторы поляризации в лабораторной системе отсчета по-прежнему имеют вид: $e_\mu^{(\nu)} = \delta_{\mu\nu}$, поэтому $A_\mu(x) = \sum_{\nu=1}^4 e_\mu^{(\nu)} A_\nu(x)$. Удобство введения векторов поляризации $e_{\mathbf{k}\mu}^{(\nu)}$, отличных по своей структуре от $e_\mu^{(\nu)}$, состоит в том, что поперечные компоненты 4-потенциала $A_{\mathbf{k}}^{(1,2)}$ входят в разложение векторов напряженности как электрического \mathbf{E} , так и магнитного \mathbf{B} полей. В то время как продольная компонента векторного потенциала $A_{\mathbf{k}}^{(3)}$ и скалярный потенциал $\varphi_{\mathbf{k}}$ входят лишь в разложение вектора напряженности электрического поля \mathbf{E} .

Как мы отмечали выше, ввиду электрической нейтральности окружающей среды и теплового движения составляющих ее атомов, статистическое среднее потенциала (6.34) равно нулю. Однако билинейные комбинации потенциалов могут быть отличны от нуля. Например, полагая заряды точечными, для произведения пространственных компонент 4-потенциала получаем

$$A_{\mathbf{k}}^{(\nu)*} A_{\mathbf{k}'}^{(\nu')} = \frac{\pi}{\hbar\omega} \frac{1}{V} \sum_{i,j} q_i q_j \langle v_i^{(\nu)} v_j^{(\nu')} \rangle \exp [i (\mathbf{k} \mathbf{r}_i - \mathbf{k}' \mathbf{r}_j)].$$

Учитывая статистическую независимость движения отдельных зарядов и компонент скорости, имеем

$$\langle A_{\mathbf{k}}^{(\nu)*} A_{\mathbf{k}'}^{(\nu')} \rangle = \frac{\pi q^2 N}{\hbar\omega V} \sum_i \langle v_i^{(\nu)} v_i^{(\nu')} \rangle \exp [i (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{r}_i] = |A_{\mathbf{k}}^{(\nu)}|^2 \delta_{\nu\nu'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (6.35a)$$

С другой стороны, получаем

$$\langle A_{\mathbf{k}}^{(\nu)*} A_{\mathbf{k}'}^{(\nu')*} \rangle = 0, \quad \langle A_{\mathbf{k}}^{(\nu)} A_{\mathbf{k}'}^{(\nu')} \rangle = 0, \quad (6.35б)$$

поскольку $\sum_i \exp [i (\mathbf{k} + \mathbf{k}') \mathbf{r}_i] = 0$. Аналогичные соотношения выполняются и для скалярного потенциала:

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}}^* \varphi_{\mathbf{k}'}^* \rangle = 0, \quad \langle \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle = 0, \quad \langle \varphi_{\mathbf{k}}^* \varphi_{\mathbf{k}'} \rangle = |\varphi_{\mathbf{k}}|^2 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (6.35в)$$

Используя статистические средние (6.35), для энергии поля получаем выражение

$$W = \sum_{\mathbf{k}\nu} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \langle A_{\mathbf{k}}^{(\nu)*}(t) A_{\mathbf{k}}^{(\nu)}(t) \rangle,$$

которое, как видно, совпадает с (6.33). Как мы отмечали выше, физический смысл амплитуд $A_{\mathbf{k}}^{(\nu)}$ состоит в том, что величина $|A_{\mathbf{k}}^{(\nu)}|^2$ определяет число квантов в моде поля (\mathbf{k}, ν) . С другой стороны, используя (6.35), мы связываем энергию равновесного поля со статистическими характеристиками движения зарядов окружающей среды. Следовательно, если окружающая среда обладает свойствами абсолютно черного тела, то статистические средние (6.35) определяются распределением Планка. В этом случае распределение энергии равновесного излучения определяется формулой Планка, а следовательно,

$$\int \langle A_{\mathbf{n}}^{(\nu)*} A_{\mathbf{n}}^{(\nu)} \rangle d\Omega_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1},$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$.

6.2.2. Спонтанный распад, обусловленный взаимодействием с поперечным равновесным полем. При описании спонтанного распада мы можем воспользоваться двухуровневой моделью атома, по-

скольку компоненты равновесного электромагнитного поля, частоты которых совпадают с частотами различных переходов в атоме, не коррелируют друг с другом. Рассмотрим радиационный переход частицы с одного из высоколежащих уровней, который мы обозначим символом 2, на один из нижележащих уровней 1. Как следует из обсуждения, проведенного в разделе 6.1.3, наибольшую величину имеют матричные элементы электродипольного взаимодействия, поэтому будем считать, что уровни 2 и 1 связаны электродипольным переходом. В этом случае система уравнений (6.6) принимает вид

$$\frac{da_2}{dt} = \frac{i}{\hbar} \mathbf{E} \mathbf{P}_{21} a_1, \quad \frac{da_1}{dt} = \frac{i}{\hbar} \mathbf{E} \mathbf{P}_{12} a_2.$$

Подставляя сюда выражение для поля в виде разложения (6.29), получаем

$$\begin{aligned} \frac{da_2}{dt} &= - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar V}} \left[A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} P_{21}^{(\alpha)}(\mathbf{k}) \exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t) - \right. \\ &\quad \left. - A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} P_{21}^{(\alpha)'}(\mathbf{k}) \exp(i\omega_{\mathbf{k}}t) \right] a_1 \exp(i\omega_{21}t), \\ \frac{da_1}{dt} &= - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar V}} \left[A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} P_{12}^{(\alpha)}(\mathbf{k}) \exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t) - \right. \\ &\quad \left. - A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} P_{12}^{(\alpha)'}(\mathbf{k}) \exp(i\omega_{\mathbf{k}}t) \right] a_2 \exp(-i\omega_{21}t), \end{aligned} \quad (6.36)$$

где

$$P_{nm}^{(\alpha)}(\mathbf{k}) = \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{nm}(\mathbf{r}) dV, \quad P_{nm}^{(\alpha)'}(\mathbf{k}) = \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \mathbf{P}_{nm}(\mathbf{r}) dV$$

и

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}).$$

Отметим, что суммирование в (6.36) ведется по $\alpha = 1, 2$, поскольку мы полагаем, что равновесное поле является поперечным. Подставляя решение второго уравнения (6.36) в первое, получаем

$$\begin{aligned} \frac{da_2}{dt} &= - \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_{\mathbf{k}\alpha, \mathbf{k}'\alpha'} \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}'}} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} P_{21}^{(\alpha)}(\mathbf{k}) \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21})t] \times \\ &\quad \times \int_0^t A_{\mathbf{k}'}^{(\alpha')*} P_{12}^{(\alpha)'}(\mathbf{k}') \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{21})t'] a_2(t') dt', \end{aligned}$$

где мы оставили только экспоненты, удовлетворяющие резонансному условию $\omega_{\mathbf{k}} \approx \omega_{21}$. В результате для населенности уровня, после статистического усреднения с учетом свойств (6.35), получаем

$$\begin{aligned} \frac{d|a_2|^2}{dt} &= - \frac{4\pi}{\hbar V} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right|^2 \omega_{\mathbf{k}} \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) \mathbf{P}_{21}(\mathbf{r}) dV \times \\ &\quad \times \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(\mathbf{r}) \mathbf{P}_{12}(\mathbf{r}) dV \frac{\sin(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21})t}{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21}} |a_2|^2. \end{aligned}$$

При V , стремящемся к бесконечности, суммирование можно заменить интегрированием по правилу: $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}$. Выполняя интегрирование по $\omega_{\mathbf{k}}$, получаем

$$\frac{d|a_2|^2}{dt} = -\frac{\omega_{21}^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_{\alpha} \int \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{21}(\mathbf{k}) \right) \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \mathbf{P}_{21}^*(\mathbf{k}) \right) |A_{\mathbf{n}}^{(\alpha)}|^2 d\Omega_{\mathbf{n}} |a_2|^2. \quad (6.37)$$

В длинноволновом приближении

$$\mathbf{P}_{21}(\mathbf{k}) = \int \mathbf{P}_{21}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) dV \approx \int \mathbf{P}_{21}(\mathbf{r}) dV = \mathbf{d}_{21}.$$

Учитывая, что

$$\sum_{\alpha} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{d}_{21} \right) \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \mathbf{d}_{21}^* \right) = (\mathbf{d}_{21} \mathbf{d}_{21}^*) - (\mathbf{n} \mathbf{d}_{21}) (\mathbf{n} \mathbf{d}_{21}^*),$$

после интегрирования в (6.37) по направлениям вектора $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k_{21}$ для скорости спонтанного распада окончательно получаем

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\omega_{21}^3 |\mathbf{d}_{21}|^2}{3\hbar c^3}. \quad (6.38)$$

Приведенный выше расчет скорости спонтанного распада основан на предположении, что поле равновесного излучения является заданным, т.е. не изменяется в процессе распада атома. Использование указанного предположения не позволяет определить направление процесса, т.е. происходит ли переход из состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией или наоборот. Последовательная теория спонтанного распада, учитывающая динамику поля равновесного излучения, будет дана в последующих главах, где мы перейдем к описанию спонтанного распада обычных атомов. Забегая вперед, отметим, что возбужденное состояние атома не является состоянием устойчивого равновесия для атома, взаимодействующего с внешним полем. Любые флуктуации поля равновесного излучения, приводящие к ненулевому значению напряженности интегрального поля в месте расположения атома, приводят к его переходу в состояние с более низкой энергией. Основное состояние атома является состоянием устойчивого равновесия, и возможность перехода атома из основного состояния в возбужденное зависит от спектральной плотности равновесного излучения и энергии перехода.

Отметим также, что энергия E_n определяется выражением (4.45). Как мы отмечали в разделе 4.2.1, величина E_n является положительной для свободной частицы, находящейся как в положительно, так и в отрицательно частотных зонах, поэтому энергетически более выгодными являются связанные состояния и частицы, и зеркальной частицы. Следовательно, взаимодействие с полем равновесного излучения, создаваемого окружением, стремится перевести частицы материального поля в связанное состояние. Отношение числа частиц, находя-

щихся в свободном и связанном состояниях, зависит от соотношения величины потенциала ионизации связанного состояния и температуры окружающей среды.

6.2.3. Межзонные переходы, обусловленные взаимодействием со скалярным полем (K-захват). Матричные элементы (6.10) в общем случае имеют вид

$$V_{nm} = \int \varphi(\mathbf{r}, t) \rho_{nm}(\mathbf{r}, t) dV - \frac{1}{c} \int \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathbf{j}_{nm}(\mathbf{r}, t) dV + \frac{q_0^2}{2m_0c^2} \int \psi_n^* A_\mu^{(e)} A_\mu^{(e)} \psi_m dV.$$

В длинноволновом приближении это выражение принимает вид

$$V_{nm} = \varphi(t) \int \rho_{nm} dV - \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \int \mathbf{j}_{nm} dV + \frac{q_0^2}{2m_0c^2} (\mathbf{A}^2(t) - \varphi^2(t)) \int \psi_n^* \psi_m dV. \quad (6.39)$$

В случае учета лишь состояний стандартного базиса состояний частицы первое слагаемое не приводит к переходам между различными уровнями атома, поскольку для состояний указанного базиса $\int \rho_{nm} dV = \int \rho_{\mathbf{nm}}^{(++)} dV = q_0 \delta_{\mathbf{nm}}$. Следовательно, если частица совершает переходы лишь между состояниями стандартного базиса состояний, то наличие внешнего скалярного поля в длинноволновом приближении не приводит к изменению населенности уровней. Амплитуды вероятности населенности уровней принимают в этом случае вид

$$a_n(t) = a_n(0) \exp\left(-i \frac{q_0}{\hbar} \int_0^t \varphi(t') dt'\right),$$

т. е. энергии всех уровней в присутствии внешнего электростатического поля сдвигаются на одинаковую величину.

Однако при учете состояний полного базиса состояний, включающего состояния как положительно, так и отрицательно частотной зон, ситуация изменяется. Действительно, собственные волновые функции состояний положительно и отрицательно частотных зон не являются ортогональными друг другу: $\int \rho_{\mathbf{nm}}^{(+-)} dV = q_0 C_{\mathbf{nm}}$. Таким образом, нестационарный скалярный потенциал электромагнитного поля $\varphi(t)$ может вызывать межзонные переходы в атоме. Как мы отмечали ранее, норма волновых функций состояний отрицательно частотной зоны может быть как положительной, так и отрицательной: $\int \rho_{\mathbf{nm}}^{(-)} dV = \pm q_0 \delta_{\mathbf{nm}}$. Однако двухуровневая модель атома применима лишь для описания переходов между состояниями с одинаковым знаком нормы, что мы и будем далее полагать.

Как видно из (6.39), правила отбора для переходов между состояниями

$$\psi_{nlm}^{(1)}(\mathbf{r}, t) = R_{nl}^{(1)}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \exp\left(-i\frac{E_{nl}^{(1)}}{\hbar}t\right)$$

и

$$\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}, t) = R_{nl}^{(2)}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \exp\left(-i\frac{E_{nl}^{(2)}}{\hbar}t\right),$$

при взаимодействии с векторным полем совпадают с правилами отбора для переходов между состояниями одного и того же базиса. Однако при взаимодействии со скалярным сферически симметричным внешним полем правила отбора принимают вид

$$l_1 = l_2, \quad m_1 = m_2. \quad (6.40)$$

Следовательно, при рассмотрении переходов между состояниями, подчиняющимися правилам отбора (6.40), мы можем не учитывать второе слагаемое в (6.39), по крайней мере в рамках длинноволнового приближения.

Третье слагаемое в (6.39) описывает так называемое пондеромоторное взаимодействие, проявляющееся в пространственно неоднородных полях, т. е. когда амплитуда поля меняется в пространстве. При переходах между состояниями с энергией $E_n^{(1)}$ этим взаимодействием можно пренебречь. Действительно, из условия ортогональности собственных функций получаем

$$\frac{E_n + E_m}{2m_0c^2} \int \psi_n^* \psi_m dV = \frac{1}{m_0c^2} \int \psi_n^* U_0 \psi_m dV,$$

учитывая, что $E_{n,m}^{(1)} \approx m_0c^2$, имеем

$$\int \psi_n^* \psi_m dV = \frac{1}{m_0c^2} \int \psi_n^* U_0 \psi_m dV \approx \frac{I_0}{m_0c^2} = \frac{1}{2} Z^2 \alpha^2 \ll 1.$$

Следовательно, это слагаемое проявляется лишь в процессах взаимодействия атома с сильными лазерными полями. При рассмотрении процессов спонтанного распада этим слагаемым практически всегда можно пренебречь.

Рассмотрим процесс спонтанного перехода между двумя ближайшими состояниями одинаковой четности, относящимися к различным зонам состояний. Как следует из вышеприведенного обсуждения, основной вклад в этот процесс дает первое слагаемое. Система уравнений для амплитуд населенности уровней принимает в этом случае вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_2}{dt} &= \int \varphi \rho_{22} dV \cdot a_2 + \int \varphi \rho_{21} dV \cdot a_1, \\ i\hbar \frac{da_1}{dt} &= \int \varphi \rho_{11} dV \cdot a_1 + \int \varphi \rho_{12} dV \cdot a_2, \end{aligned} \quad (6.41)$$

где

$$\rho_{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m_0 c^2} \psi_{n_i}^{(i)*}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{E_{n_i}^{(i)} + E_{n_j}^{(j)}}{2} - U_0 \right) \psi_{n_j}^{(j)}(\mathbf{r}, t).$$

Скалярный потенциал равновесного электромагнитного поля определяется выражением (6.32)

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}} [\varphi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega_{\mathbf{k}} t) + \varphi_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \exp(i\omega_{\mathbf{k}} t)], \quad (6.42)$$

где $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. Как мы отмечали выше, двухуровневую модель атома мы можем использовать лишь для исследования переходов между состояниями различных зон, которым отвечают одинаковые знаки нормы волновой функции, поскольку исходя из закона сохранения заряда переходы между состояниями с различным знаком нормы могут быть описаны лишь в рамках модели, учитывающей как минимум четыре состояния. Как видно из рис. 5.14, примером близко лежащих связанных состояний двух спектров с одинаковой нормой волновой функции являются состояния $(n_1 = 0, l_1 = 0)$ и $(n_2 = 1, l_2 = 0)$. Поскольку волновые функции состояний спектра $E^{(2)}$ являются сингулярными в нуле, то указанный переход аналогичен процессу K -захвата в атоме. В этом случае, ввиду ортонормированности волновых функций каждого из базисов, диагональные слагаемые в (6.41) приводят к одинаковым сдвигам каждого из уровней, поэтому их можно исключить с помощью преобразования

$$a_i(t) = b_i(t) \exp\left(-i\frac{q_0}{\hbar} \int_0^t \varphi(t') dt'\right).$$

Для амплитуд b_i в резонансном приближении получаем

$$\frac{db_2}{dt} = -i\frac{q_0}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \varphi_{\mathbf{k}} \rho_{21}(\mathbf{k}) \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21})t] b_1(t),$$

$$\frac{db_1}{dt} = -i\frac{q_0}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \varphi_{\mathbf{k}}^* \rho_{12}(\mathbf{k}) \exp[i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21})t] b_2(t),$$

где

$$\rho_{21}(\mathbf{k}) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \psi_{n_2}^{(2)*}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{E_{n_2}^{(2)} + E_{n_1}^{(1)}}{2} - U_0 \right) \psi_{n_1}^{(1)}(\mathbf{r}, t) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) dV$$

и $\rho_{12}(\mathbf{k}) = \rho_{21}^*(\mathbf{k})$.

С помощью преобразований, аналогичных преобразованиям раздела 6.2.2, окончательно получаем

$$\frac{d|b_2|^2}{dt} = -\frac{q_0^2 \omega_{21}}{\pi \hbar c} \int \rho_{21}(\mathbf{k}) \rho_{12}(\mathbf{k}) |\varphi_{\mathbf{n}}|^2 d\Omega_{\mathbf{n}} |b_2|^2.$$

В длинноволновом приближении $\rho_{21}(\mathbf{k}) = C_{21}$, где C_{21} суть коэффициенты разложения волновых функций одного базиса по волновым функциям другого. Некоторые из этих коэффициентов представлены графически на рис. 5.13, 5.14. Таким образом, для скорости спонтанного перехода получаем

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4q_0^2 \omega_{21} |C_{21}|^2}{\hbar c} n_0(\omega_{21}) = 4\alpha \omega_{21} |C_{21}|^2 n_0(\omega_{21}), \quad (6.43)$$

где

$$n_0(\omega_{21}) = \int |\varphi_{\mathbf{n}}|^2 d\Omega_{\mathbf{n}}$$

— число квантов равновесного излучения на частоте рассматриваемого перехода, определяющееся в случае абсолютно черного тела распределением Планка.

Как видно из рис. 5.14, при $Z\alpha \ll 1$ наибольшую величину матричные элементы C_{21} имеют для перехода из $(n_2 = 1, l_2 = 0)$ в $(n_1 = 0, l_1 = 0)$ состояние. Используя (5.57) и (5.72), для разности энергий указанных переходов получаем

$$\Delta E = 2m_0 c^2 Z^4 \alpha^4,$$

откуда следует

$$\frac{1}{T_1} (n_2 = 1 \rightarrow n_1 = 0) = 4\alpha \omega_{21} |C_{21}|^2 = 8 \frac{m_0 c^2}{\hbar} Z^4 \alpha^5 |C_{21}|^2.$$

Отметим, что величина $|\rho_{21}|^2$ для рассматриваемого перехода близка к единице.

С другой стороны, учитывая, что для переходов между состояниями стандартного базиса состояний характерное значение дипольного момента перехода определяется выражением $d_0 = q_0 a_0 / Z$, для $2p \rightarrow 1s$ перехода из (6.38) получаем

$$\frac{1}{T_1} (2p \rightarrow 1s) = \frac{4}{3} \frac{m_0 c^2}{\hbar} Z^4 \alpha^5 \left| \frac{d(2p \rightarrow 1s)}{d_0} \right|^2.$$

Как мы отмечали в разделе 6.2.1, поперечное поле есть суперпозиция равновесного и свободного полей. Обычно полагают, что свободное поле характеризуется равномерным энергетическим распределением $n_0(\omega) = 1$. С другой стороны, амплитуды свободного продольного и скалярного полей связаны соотношением (6.31) и вклада в энергию поля не дают, поэтому спонтанные переходы между состояниями одинаковой четности обусловлены взаимодействием с равновесным излучением. Приведенные выше выражения скоростей спонтанного распада для двух типов переходов показывают, что, если в (6.43) положить $n_0 \approx 1$, то характерные скорости спонтанного распада будут иметь сопоставимые величины.

6.2.4. Межзонные переходы, обусловленные взаимодействием с поперечным полем. Как мы отмечали выше, норма волновых функций отрицательно частотного спектра состояний частицы в кулоновском поле может быть как положительной, так и отрицательной и определяется знаком $\Gamma(n - 2s_l)$, поэтому радиационные переходы, обусловленные взаимодействием с поперечным электромагнитным полем, могут происходить как между состояниями стандартного базиса состояний, так и между состояниями различных базисов. Если начальное состояние принадлежит стандартному базису состояний, а конечное состояние принадлежит отрицательно частотной зоне состояний, но с положительной нормой волновой функции, то такие переходы могут быть описаны в рамках модели двухуровневого атома. Поскольку волновые функции отрицательно частотного спектра сингулярны в нуле, то из общих соображений ясно, что величина матричных элементов переходов между состояниями различных базисов будет много меньше величины матричных элементов переходов между состояниями стандартного базиса. Действительно, сравним, например, матричные элементы следующих переходов:

$$\begin{aligned} \langle n_1 = 0, l_1 = 0 | \mathbf{e}_z \mathbf{r} | n_1 = 0, l_1 = 1 \rangle &= \frac{128\sqrt{2}}{243} a_0 (1 + o(\alpha^2)), \\ \langle n_1 = 0, l_1 = 0 | \mathbf{e}_z \mathbf{r} | n_2 = 2, l_2 = 1 \rangle &= a_0 \alpha \left(1 + \frac{5}{9} \alpha^2 + \dots \right), \\ \langle n_2 = 1, l_2 = 0 | \mathbf{r} \mathbf{e}_z | n_2 = 2, l_2 = 1 \rangle &= -a_0 \alpha \left(1 + \frac{5}{9} \alpha^2 + \dots \right). \end{aligned}$$

Как видно, величина матричных элементов межзонных переходов в α^{-1} раз меньше величины матричных элементов переходов между состояниями стандартного базиса частицы в кулоновском поле. Учитывая, что вероятность спонтанного перехода пропорциональна квадрату матричных элементов, несложно видеть, что в мезоатомах с легкими ядрами переходы между состояниями стандартного базиса более вероятны, чем межзонные переходы. Отметим, что величина матричных элементов переходов между состояниями отрицательно частотного спектра также в α^{-1} раз меньше величины матричных элементов переходов между состояниями положительно частотного спектра.

Состояние $(n_2 = 2, l_2 = 1)$ относится к подзоне состояний $E^{(2)} \approx \approx m_0 c^2$, поэтому энергия перехода из этого состояния в основное состояние стандартного базиса лежит в пределах $\Delta E = E_{21}^{(2)} - E_{00}^{(1)} \ll I_0$. В принципе, межзонные радиационные переходы могут происходить и на уровни подзоны глубоколежащих состояний. Например, состояние $(n_2 = 0, l_2 = 0)$ также имеет положительную норму волновой функции, поэтому радиационный распад $2p$ -состояния водородоподобного атома (состояние $(n_1 = 0, l_1 = 1)$ в наших обозначениях) может происходить как в $1s^{(1)}$ -состояние $(n_1 = 0, l_1 = 0)$, так и в $1s^{(2)}$ -состояние $(n_2 = 0, l_2 = 0)$.

Сравним радиальные матричные элементы указанных переходов:

$$d(2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(1)}) = \int R_{2p}^{(1)}(r)R_{1s}^{(1)}(r)r^3 dr,$$

$$d(2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(2)}) = \int R_{2p}^{(1)}(r)R_{1s}^{(2)}(r)r^3 dr.$$

Они могут быть вычислены в аналитическом виде с использованием формул (5.62). Однако ввиду громоздкости соответствующих выражений приведем лишь их предельное значение для случая легких ядер ($Z\alpha \ll 1$):

$$d(2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(1)}) \approx \frac{a_0}{Z} \frac{128}{81} \sqrt{\frac{2}{3}} + \dots,$$

$$d(2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(2)}) \approx a_0 \frac{\sqrt{3}}{2} Z^3 \alpha^4 + \dots$$

Отношение указанных матричных элементов равно

$$\frac{d(2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(2)})}{d(2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(1)})} = \frac{243}{256\sqrt{2}} Z^4 \alpha^4. \quad (6.44)$$

Как и следовало ожидать, величина дипольного момента перехода в $1s^{(2)}$ -состояние существенно меньше величины дипольного момента перехода в $1s^{(1)}$ -состояние, поскольку радиус $1s^{(2)}$ -оболочки существенно меньше радиуса $1s^{(1)}$ -оболочки мезоатома.

При переходах между высоколежащими уровнями мезоатома условие применимости длинноволнового приближения $a_0 \ll \lambda$ заведомо выполняется. Однако для переходов из высоколежащего состояния в глубоколежащее это условие перестает выполняться, поскольку энергия кванта поля, испускаемого при таком переходе, становится близкой к энергии покоя частицы. В этом случае мы должны использовать общее выражение для матричных элементов:

$$d_{21}^{(\lambda)} = \int \mathbf{e}^{(\lambda)} \mathbf{P}_{21}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{kr}) dV.$$

Пусть волновой вектор направлен вдоль оси z , интегрируя по угловым переменным, для проекции матричного элемента на ось x , например, получаем

$$\langle m_1 = \pm 1 | x | m_2 = 0 \rangle = -im_1 \sqrt{\frac{3}{2}} r \frac{\sin kr - kr \cos kr}{(kr)^3}.$$

Вид функции $f(kr)$

$$f(kr) = \frac{\sin kr - kr \cos kr}{(kr)^3}$$

показан на рис. 6.1. В длинноволновом пределе $ka_0 \ll 1$ эта функция равна $f(0) = 1/3$ и рассматриваемый матричный элемент принимает вид

$$\langle m_1 = \pm 1 | x | m_2 = 0 \rangle = -im_1 \frac{a_0}{\sqrt{6}}.$$

Однако для величины волнового вектора электромагнитной волны, частота которой резонансна частоте перехода $2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(2)}$ мезоатома, получаем

$$k = \frac{m_0 c^2}{\hbar c} = \frac{2\pi}{\lambda_C},$$

где λ_C — комптоновская длина волны. Как видно из рис. 6.1, пространственная полуширина функции $f(kr)$ может быть оценена как $\Delta r \approx 1/k$. В случае перехода $2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(2)}$ получаем: $\Delta r \leq \lambda_C$. Следовательно, выражение (6.44) дает завышенную оценку для отношения матричных элементов переходов $2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(2)}$ и $2p^{(1)} \leftrightarrow 1s^{(1)}$.

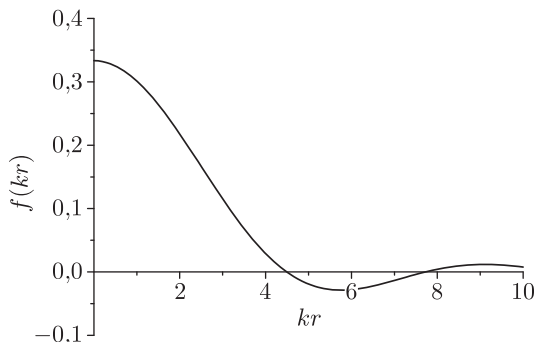


Рис. 6.1. К расчету матричных элементов

Таким образом, в мезоатомах с легкими ядрами вероятность радиационных межзонных переходов гораздо ниже вероятности переходов между состояниями стандартного базиса. Однако с ростом заряда ядра вероятность межзонных переходов начинает существенно возрастать. Такое поведение матричных элементов межзонных переходов однозначно определяется свойствами волновых функций отрицательно частотной зоны состояний, обсуждавшихся в разделе 5.4.

6.3. Водородоподобный мезоатом

Водородоподобный мезоатом, состоящий из положительно заряженного ядра и взаимодействующей с ним отрицательно заряженной частицы, является простейшим примером многочастичной системы. Как мы уже отмечали ранее, спектр собственных состояний частицы в кулоновском поле заведомо отличается от спектра состояний указанной двухчастичной системы. Действительно, вид угловой части волновых функций задачи о движении частицы в кулоновском поле полностью детерминирован законом сохранения углового момента при движении частицы в сферически симметричном внешнем поле. Однако при учете конечности массы ядра атома угловой момент частицы заведомо не является сохраняющейся величиной, поскольку угловой

момент атома является суммой угловых моментов частицы и ядра. В отсутствие внешних электромагнитных полей многочастичная система взаимодействующих заряженных частиц является замкнутой системой, поэтому характер ее динамики определяется интегралами движения, присущими замкнутой системе. В настоящем разделе мы получим уравнения для многочастичной задачи и обсудим различные приближения, которые можно использовать при анализе этой сложной проблемы.

6.3.1. Действие для ансамбля заряженных частиц. В гл. 3 на основании анализа трансформационных свойств скалярной волновой функции при преобразованиях Лоренца мы привели выражение для действия скалярной частицы. Действие является аддитивной функцией, поэтому действие для ансамбля частиц, взаимодействующих посредством электромагнитного поля, получается из (3.37) суммированием по отдельным частицам ансамбля. При этом необходимо учесть, что каждая частица движется в поле, создаваемом всеми остальными частицами ансамбля:

$$S = \frac{1}{16\pi} \int F_{\mu\nu} F_{\nu\mu} dV dt - \sum_{\substack{ca, b \\ (a \neq b)}} \frac{1}{2m_a} \int \left[-\frac{1}{c^2} \left(-i\hbar \frac{\partial \psi_a^*}{\partial t} - q_a \varphi_b(\mathbf{r}_a) \psi_a^* \right) \left(i\hbar \frac{\partial \psi_a}{\partial t} - q_a \varphi_b(\mathbf{r}_a) \psi_a \right) + \left(i\hbar \nabla \psi_a^* - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) \psi_a^* \right) \left(-i\hbar \nabla \psi_a - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) \psi_a \right) + m_a^2 c^2 \psi_a^* \psi_a \right] dV_a dt. \quad (6.45)$$

Варьирование действия (6.45) по ψ_a^* приводит нас к уравнениям, совпадающим по виду с уравнениями для одиночной частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле:

$$\frac{1}{2m_a} \sum_{b(\neq a)} \left[\left(\mathbf{p}_a - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_a \varphi_b(\mathbf{r}_a) \right)^2 + m_a^2 c^2 \right] \psi_a = 0, \quad (6.46)$$

а варьирование действия по потенциалам поля приводит нас к уравнениям для поля, в которых 4-вектор плотности тока есть сумма плотностей тока отдельных частиц:

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \sum_a \mathbf{j}_a(\mathbf{r}, t), \quad (6.47)$$

$$\Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi \sum_a \rho_a(\mathbf{r}, t). \quad (6.48)$$

При выводе уравнений для поля (6.47)–(6.48) мы воспользовались условием лоренцевой калибровки

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (6.49)$$

Компоненты 4-вектора плотности тока, входящие в (6.47)–(6.48), имеют вид

$$\mathbf{j}_a(\mathbf{r}, t) = \frac{q_a}{m_a} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\nabla \psi_a^* \cdot \psi_a - \psi_a^* \nabla \psi_a \right) - \frac{q_a}{c} \sum_{b(\neq a)} \psi_a^* \mathbf{A}_b(\mathbf{r}, t) \psi_a \right], \quad (6.50)$$

$$\rho_a(\mathbf{r}, t) = \frac{q_a}{m_a c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \psi_a^*}{\partial t} \psi_a - \psi_a^* \frac{\partial \psi_a}{\partial t} \right) - q_a \sum_{b(\neq a)} \psi_a^* \varphi_b(\mathbf{r}, t) \psi_a \right]. \quad (6.51)$$

Следует обратить внимание на следующие обстоятельства. Из формул (6.47)–(6.51) следует, что, во-первых, векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля, создаваемого ансамблем заряженных частиц, являются суммой потенциалов полей, создаваемых отдельными частицами, и, во-вторых, каждая частица движется в поле, создаваемом всеми остальными частицами ансамбля.

При движении частицы в заданном внешнем поле, т. е. при фиксированном положении всех частиц за исключением рассматриваемой, действие является функционалом только ее волновой функции. Варьирование действия в этом случае мы можем проводить лишь по волновой функции ψ_a^* выделенной частицы, что приводит нас к уравнению (6.46). Решения этого уравнения определяют экстремумы полной энергии частицы, являющейся суммой кинетической энергии движения частицы и ее потенциальной энергии в заданном внешнем поле.

Атом является нейтральным ансамблем заряженных частиц, поэтому в отсутствие внешних полей достигаемые минимумы действия должны реализовывать экстремумы полной энергии атома, состоящей из кинетической энергии движения составляющих атом частиц и энергии создаваемого ими поля (см. раздел 4.1.3). В отсутствие внешнего электромагнитного поля 4-потенциал электромагнитного поля, фигурирующий в действии (6.45), является функционалом от волновых функций, составляющих атом частиц. Указанная функциональная зависимость определяется уравнениями (6.47)–(6.48), правые части которых определяются выражениями (6.50)–(6.51). Для того чтобы проиллюстрировать возникающие отличия, проведем следующее преобразование первого слагаемого в действии (6.45):

$$\begin{aligned} S_f &= \frac{1}{16\pi} \int F_{\mu\nu} F_{\nu\mu} dV dt = \frac{1}{8\pi} \int \left[A_\mu \frac{\partial^2 A_\mu}{\partial x_\nu^2} + \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(A_\nu \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} \right) \right) \right] dV dt = \\ &= -\frac{1}{2c} \int A_\mu j_\mu dV dt + \frac{1}{8\pi} \int \frac{\partial}{\partial x_\mu} (A_\nu F_{\nu\mu}) dV dt. \quad (6.52) \end{aligned}$$

Поскольку атом является в целом нейтральной системой, а второй интеграл в последнем выражении есть интеграл от 4-дивергенции и, следовательно, обращается в нуль, то S_f принимает вид

$$S_f = -\frac{1}{2c} \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \int \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) \mathbf{j}_a(\mathbf{r}_a) dV_a dt + \frac{1}{2} \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \int \varphi_b(\mathbf{r}_a) \rho_a(\mathbf{r}_a) dV_a dt. \quad (6.53)$$

Подставляя(6.53) в(6.45), получаем

$$S = \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{1}{2m_a c^2} \int \psi_a^* \cdot \left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - i\hbar q_a \varphi_b \frac{\partial}{\partial t} - c^2 \left(\mathbf{p}_a^2 + m_a^2 c^2 - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b \mathbf{p}_a \right) \right] \psi_a dV_a dt - \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{i\hbar}{2m_a c^2} \int \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left[\psi_a^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{q_a}{2c} A_{b\mu} \right) \psi_a \right] dV dt.$$

Полагая, что интеграл от 4-дивергенции равен нулю, окончательно получаем

$$S = \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{1}{2m_a c^2} \int \psi_a^* \cdot \left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - i\hbar q_a \varphi_b \frac{\partial}{\partial t} - c^2 \left(\mathbf{p}_a^2 + m_a^2 c^2 - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b \mathbf{p}_a \right) \right] \psi_a dV_a dt. \quad (6.54)$$

Отметим, что 4-потенциал, входящий в действие (6.54), является потенциалом электромагнитного поля, создаваемого частицами рассматриваемого ансамбля. Например, потенциал поля, создаваемого частицей b в месте расположения частицы a , определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a, t) &= \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{j}_b(\mathbf{r}_b, t - r_{ab}/c)}{r_{ab}} dV_b, \\ \varphi_b(\mathbf{r}_a, t) &= \int \frac{\rho_b(\mathbf{r}_b, t - r_{ab}/c)}{r_{ab}} dV_b \end{aligned} \quad (6.55)$$

и $r_{ab} = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$.

6.3.2. Водородоподобный мезоатом. В случае водородоподобного мезоатома действие(6.54) принимает вид

$$S = \frac{1}{2m_e c^2} \int \psi_e^* \cdot \left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - i\hbar q_e \varphi_n \frac{\partial}{\partial t} - c^2 \left(\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2 - \frac{q_e}{c} \mathbf{A}_n \mathbf{p}_e \right) \right] \psi_e dV_e dt + \frac{1}{2m_n c^2} \int \psi_n^* \cdot \left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - i\hbar q_n \varphi_e \frac{\partial}{\partial t} - c^2 \left(\mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^2 - \frac{q_n}{c} \mathbf{A}_e \mathbf{p}_n \right) \right] \psi_n dV_n dt, \quad (6.56)$$

где $\psi_e(\mathbf{r}, t)$ — волновая функция отрицательно заряженной частицы, а $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ — волновая функция ядра.

При варьировании действия (6.56) по волновой функции ψ_e^* мы должны учитывать, что потенциалы поля \mathbf{A}_e и φ_e являются функциями указанной функции и указанная функциональная связь определяется выражениями(6.55). Следовательно, для волновых функций частицы и ядра получаем следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_e c^2} \left[(i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - i\hbar q_e \varphi_n \frac{\partial}{\partial t} - c^2 \left(\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2 - \frac{q_e}{c} \mathbf{A}_n \mathbf{p}_e \right) \right] \psi_e - \\ - \frac{i\hbar}{2m_e m_n c^4} \int \psi_n'^* \frac{q_e q_n}{r_{en}'} \frac{\partial \psi_n'}{\partial t'} dV_n' \left(i\hbar \frac{\partial \psi_e}{\partial t} - q_e \varphi_n \psi_e \right) + \\ + \frac{1}{2m_n c} \int \psi_n'^* \frac{q_e q_n}{r_{en}'} \mathbf{p}_n' \psi_n' dV_n' \cdot \mathbf{v}_e \psi_e = 0, \quad (6.57a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_n c^2} \left[(i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - i\hbar q_n \varphi_e \frac{\partial}{\partial t} - c^2 \left(\mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^2 - \frac{q_n}{c} \mathbf{A}_e \mathbf{p}_n \right) \right] \psi_n - \\ - \frac{i\hbar}{2m_e m_n c^4} \int \psi_e'^* \frac{q_e q_n}{r_{ne}'} \frac{\partial \psi_e'}{\partial t'} dV_e' \left(i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} - q_n \varphi_e \psi_n \right) + \\ + \frac{1}{2m_e c} \int \psi_e'^* \frac{q_e q_n}{r_{ne}'} \mathbf{p}_e' \psi_e' dV_e' \cdot \mathbf{v}_n \psi_n = 0, \quad (6.57b) \end{aligned}$$

где оператор \mathbf{v}_b определяется выражением

$$\mathbf{v}_b = \frac{1}{m_b} \left(\mathbf{p}_b - \frac{q_b}{c} \mathbf{A}_a(\mathbf{r}_b) - \frac{i\hbar |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}{2} \nabla_b \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} \right), \quad (6.58)$$

появление последнего слагаемого в (6.58) обусловлено использованием следующего преобразования:

$$\mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a, t) = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{j}_b(\mathbf{r}_b, t - r_{ab}/c)}{r_{ab}} dV_b = \frac{q_b}{c} \int \psi_b^* \frac{1}{r_{ab}} \mathbf{v}_b \psi_b dV_b.$$

Штрихи в подынтегральных волновых функциях в уравнениях (6.57а, б) обусловлены учетом эффектов запаздывания, приводящих к тому, что последнее слагаемое в действии(6.53) имеет, например, вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\substack{ca, b \\ (a \neq b)}} \int \varphi_b(\mathbf{r}_a, t) \rho_a(\mathbf{r}_a, t) dV_a dt = \\ = \frac{1}{2} \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \int \frac{\rho_b(\mathbf{r}_b, t - r_{ab}/c) \rho_a(\mathbf{r}_a, t)}{r_{ab}} dV_b dV_a dt. \end{aligned}$$

Несложно видеть, что в пределе бесконечно тяжелого ($m_n \rightarrow \infty$) и точечного ($\rho_n(\mathbf{r}_n) \rightarrow q_n \delta(\mathbf{r}_n)$) ядра уравнение (6.57а) совпадает

с уравнением одиночной частицы, взаимодействующей с кулоновским полем:

$$\frac{1}{2m_e c^2} \left[(i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 (\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2) - 2i\hbar \frac{q_e q_n}{r_e} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{q_e^2 q_n^2}{r_e^2} \right] \psi_e = 0.$$

6.3.3. Стационарный случай. Проведенный выше анализ показывает, что последовательная теория, позволяющая проводить точный расчет стационарных состояний водородоподобного атома, должна базироваться на решении следующей системы связанных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_{e,n}} \left[\left(\mathbf{p}_{e,n} - \frac{q_{e,n}}{c} \mathbf{A}_{n,e}(\mathbf{r}_{e,n}) \right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{c^2} (E_{e,n} - q_{e,n} \varphi_{n,e}(\mathbf{r}_{e,n}))^2 + m_{e,n}^2 c^2 \right] \psi_{e,n} = 0, \\ \Delta_{e,n} \mathbf{A}_{e,n} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{e,n}, \quad \Delta_{e,n} \varphi_{e,n} = -4\pi \rho_{e,n}. \end{aligned}$$

Указанная система уравнений включает два скалярных уравнения для волновых функций частицы и ядра и два четырехмерных уравнения для потенциалов создаваемого ими электромагнитного поля. Таким образом, указанная система уравнений состоит из десяти скалярных дифференциальных уравнений второго порядка по пространственным производным.

Вместе с тем, используя решения уравнений для электромагнитного поля в виде (6.55), указанную систему десяти дифференциальных уравнений можно свести к двум уравнениям для стационарных волновых функций частицы и ядра, которые непосредственно следуют из (6.57а, б):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_e c^2} (E_e^2 - c^2 (\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2)) \psi_e - \frac{E_e}{2m_e m_n c^4} \int \psi_n^* \frac{q_e q_n}{r_{en}} (E_n - q_n \varphi_e) \psi_n dV_n \cdot \psi_e - \\ - \frac{E_n}{2m_e m_n c^4} \int \psi_n^* \frac{q_e q_n}{r_{en}} \psi_n dV_n \cdot (E_e - q_e \varphi_n) \psi_e + \\ + \frac{1}{2m_e c} \int \psi_n^* \frac{q_e q_n}{r_{en}} \mathbf{v}_n \psi_n dV_n \cdot \mathbf{p}_e \psi_e + \frac{1}{2m_n c} \int \psi_n^* \frac{q_e q_n}{r_{en}} \mathbf{p}_n \psi_n dV_n \cdot \mathbf{v}_e \psi_e = 0, \end{aligned} \quad (6.59a)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_n c^2} (E_n^2 - c^2 (\mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^2)) \psi_n - \frac{E_e}{2m_e m_n c^4} \int \psi_e^* \frac{q_e q_n}{r_{ne}} (E_e - q_e \varphi_n) \psi_e dV_e \cdot \psi_n - \\ - \frac{E_n}{2m_e m_n c^4} \int \psi_e^* \frac{q_e q_n}{r_{ne}} \psi_e dV_e \cdot (E_n - q_n \varphi_e) \psi_n + \\ + \frac{1}{2m_n c} \int \psi_e^* \frac{q_e q_n}{r_{ne}} \mathbf{v}_e \psi_e dV_e \cdot \mathbf{p}_n \psi_n + \frac{1}{2m_e c} \int \psi_e^* \frac{q_e q_n}{r_{ne}} \mathbf{p}_e \psi_e dV_e \cdot \mathbf{v}_n \psi_n = 0. \end{aligned} \quad (6.59б)$$

Как видно, система уравнений (6.59а, б) не является полностью замкнутой, поскольку по-прежнему включает потенциалы полей $A_\mu(x_a)$. Однако она становится замкнутой при выполнении следующих условий:

$$\begin{aligned} \frac{E_a}{m_a c^2} \int \psi_a^* \psi_a dV_a &\gg \frac{1}{m_a c^2} \int \psi_a^* q_a \varphi_b \psi_a dV_a, \\ \int \psi_a^* \mathbf{p}_a \psi_a dV_a &\gg \frac{q_a}{c} \int \psi_a^* \mathbf{A}_b \psi_a dV_a. \end{aligned} \quad (6.60)$$

Эти условия имеют простую физическую интерпретацию. Первое условие выполняется, если энергия связи частицы в атоме много меньше энергии покоя частицы. Если обратиться к решениям, полученным в разделе 5.2, то становится ясно, что это условие означает выполнение следующего соотношения:

$$I_0 \ll m_a c^2,$$

где потенциал ионизации I_0 определяется равенством (5.66). Второе условие также заведомо выполняется для состояний стандартного базиса, поскольку кинетическая энергия движения частиц, находящихся в этих состояниях, близка к массе покоя¹⁾, а следовательно, скорость движения много меньше скорости света. Действительно, учитывая (6.55), получаем

$$\frac{\hbar}{a_0} \gg \frac{Z e^2 \langle v \rangle}{c a_0 c},$$

где $\langle v \rangle$ — квантово-механическое среднее скорости орбитального движения частиц. Последнее условие можно переписать в виде

$$c \gg Z \alpha \langle v \rangle.$$

Это условие заведомо выполняется, по крайней мере для атомов с не очень тяжелыми ядрами.

Учитывая результаты рассмотрения, проведенного в разделе 5.3, несложно видеть, что система уравнений (6.59а, б) дает широкие возможности расчета поправок к энергетическому спектру состояний водородоподобного мезоатома по отношению к энергетическому спектру состояний стандартного базиса состояний частицы, взаимодействующей с кулоновским полем.

Вместе с тем использование приближений (6.60) не дает возможности расчета поправок к спектру отрицательно частотных состояний, поскольку использование приближений (6.60) приводит к потере слагаемых в потенциальной энергии взаимодействия частиц, пропорциональных $(q_e q_n / r_{en})^2$. Как было показано в разделе 5.4, именно эти слагаемые приводят к появлению спектра связанных состояний зеркальной частицы. Следовательно, для расчета указанных состояний

¹⁾ Напомним, что кинетическая энергия определяется с учетом массы покоя частицы (см. сноску в разделе 4.1.3).

в уравнениях (6.59а, б) необходимо удерживать члены, пропорциональные r_{en}^{-2} .

6.3.4. Энергия ансамбля заряженных частиц. Подробное обсуждение определения энергии одиночной частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем, было приведено в разделе 4.1.3. Поэтому мы можем воспользоваться здесь результатами указанного рассмотрения, учтя лишь то обстоятельство, что в настоящем разделе нас интересует энергия ансамбля заряженных частиц, взаимодействующих посредством электромагнитного поля, и, следовательно, электромагнитное поле не является внешним, а создается частицами ансамбля.

Итак, в соответствии с формулой (4.56) энергия ансамбля заряженных частиц определяется выражением

$$\begin{aligned}
 E(t) = & \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{1}{2m_a} \int \left[\left(\left(\mathbf{p} + \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b \right)^2 + m_a^2 c^2 \right) \psi_a^* \cdot \psi_a + \right. \\
 & \left. + \psi_a^* \cdot \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b \right)^2 + m_a^2 c^2 \right) \psi_a \right] dV_a + \\
 & + \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) dV + \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{\hbar^2}{4m_a c^2} \frac{d}{dt} \int \left(\frac{\partial \psi_a^*}{\partial t} \psi_a + \psi_a^* \frac{\partial \psi_a}{\partial t} \right) dV_a \quad (6.61)
 \end{aligned}$$

и является суммой энергии электромагнитного поля, создаваемого частицами ансамбля, кинетической энергии движения частиц и «обменной» энергии. Последнее слагаемое отлично от нуля лишь в процессе перехода мезоатома из одного стационарного состояния в другое, а в стационарном состоянии оно обращается в нуль.

Таким образом, полная энергия ансамбля заряженных частиц в стационарном состоянии является суммой энергии создаваемого ими поля и кинетической энергии движения частиц, что совпадает с классическим определением энергии системы заряженных частиц.

6.3.5. Вариационный принцип. Вариационный принцип основан на том, что собственным состояниям ансамбля взаимодействующих частиц отвечают состояния, осуществляющие минимум функционала энергии. Основным состоянием является состояние, для которого достигается глобальный минимум функционала энергии. Состояния, в которых достигаются локальные минимумы функционала энергии, являются квазистационарными, поскольку взаимодействие с окружением приводит к переходам частиц из этих состояний в основное состояние мезоатома. Вариационный принцип особенно удобен при численном решении задач на собственные значения. Сначала определяется глобальный минимум функционала энергии, а при расчете волновых функций возбужденных состояний в качестве конкурирующих допус-

каются лишь функции, ортогональные волновой функции основного состояния.

С общетеоретической точки зрения варьирование функционала энергии эквивалентно варьированию действия при наложении условий связи, учитывающих, что энергия электромагнитного поля, создаваемого частицами ансамбля, зависит от их взаимного расположения. Эти условия связи накладываются уравнениями (6.47)–(6.48). Однако удобство варьирования функционала энергии проявляется в том, что слагаемые функционала энергии имеют смысл энергии взаимодействия, а следовательно, они практически всегда могут быть интерпретированы в рамках классической электродинамики.

Учитывая преобразования, выполненные в разделе 4.1.3, выражение для энергии ансамбля заряженных частиц, взаимодействующих с электромагнитным полем, можно записать также в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 E = & \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) dV + \\
 & + \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{1}{2m_a c^2} \int \left(-i\hbar \frac{\partial \psi_a^*}{\partial t} - q_a \varphi_b(\mathbf{r}_a) \psi_a^* \right) \left(i\hbar \frac{\partial \psi_a}{\partial t} - q_a \varphi_b(\mathbf{r}_a) \psi_a \right) dV_a + \\
 & + \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{1}{2m_a} \int \psi_a^* \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) \right)^2 + m_a^2 c^2 \right] \psi_a dV_a. \quad (6.62)
 \end{aligned}$$

Это выражение отличается от выражения (4.55) лишь неучетом последнего слагаемого в (4.49), которое является полной трехмерной дивергенцией, и потому в стационарных состояниях атома пространственный интеграл от этого слагаемого равен нулю. Вместе с тем выражение (6.62) дает возможность более компактной записи последующих выражений.

Рассмотрим водородоподобный мезоатом. В стационарном состоянии волновые функции частиц системы имеют вид

$$\psi_a(\mathbf{r}, t) = \psi_a(\mathbf{r}) \exp(-iE_a t/\hbar).$$

Нас интересуют экстремумы функционала энергии (6.62), которые позволяют определить стационарные состояния, т.е. собственные значения и собственные волновые функции двухчастичной задачи. Энергия ансамбля заряженных частиц складывается из кинетической энергии движения частиц и энергии создаваемого ими поля. Общий алгоритм решения задачи состоит в том, что, используя решения уравнений для поля (6.47) и (6.48), мы исключаем из выражения (6.62) полевые переменные, сводя его к виду, зависящему лишь от операторов частиц. Для энергии поля в стационарном случае получаем

$$E_{em} = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) dV = \frac{1}{8\pi} \int \left((\nabla \varphi)^2 + (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right) dV.$$

Пользуясь соотношениями векторной алгебры:

$$(\nabla\varphi)^2 = -\varphi\Delta\varphi + \operatorname{div}(\varphi\nabla\varphi), \quad (\operatorname{rot}\mathbf{A})^2 = \operatorname{div}[\mathbf{A}\operatorname{rot}\mathbf{A}] + \mathbf{A}\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A},$$

получаем

$$E_{em} = \frac{1}{2} \int \left[\varphi_n(\mathbf{r}_e) \rho_e(\mathbf{r}_e) + \frac{1}{c} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}_e) \mathbf{j}_e(\mathbf{r}_e) \right] dV_e + \\ + \frac{1}{2} \int \left[\varphi_e(\mathbf{r}_n) \rho_n(\mathbf{r}_n) + \frac{1}{c} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_n) \mathbf{j}_n(\mathbf{r}_n) \right] dV_n, \quad (6.63)$$

где $\varphi_b(\mathbf{r}_a)$ и $\mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a)$ — потенциалы полей, создаваемых частицей $b = (n, e)$ в месте расположения частицы $a = (e, n)$. При выводе (6.63) мы учли, что атом является в целом нейтральной системой, поэтому пространственные интегралы от трехмерной дивергенции по бесконечному пространственному объему обращаются в нуль, а также воспользовались лоренцевской калибровкой электромагнитного поля, которая в стационарном случае совпадает с кулоновской ($\operatorname{div}\mathbf{A} = 0$). Подстановка в (6.63) выражений (6.50)–(6.51) позволяет нам получить выражение для энергии взаимодействия в виде функционала от волновых функций частиц:

$$E_{em} = \frac{q_e}{2m_e c^2} \int \psi_e^*(E_e - q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e)) \varphi_n(\mathbf{r}_e) \psi_e dV_e + \\ + \frac{q_n}{2m_n c^2} \int \psi_n^*(E_n - q_n \varphi_e(\mathbf{r}_n)) \varphi_e(\mathbf{r}_n) \psi_n dV_n - \\ - \frac{q_e}{2m_e c} \int \psi_e^* \mathbf{A}_n \mathbf{p}_e \psi_e dV_e + \frac{q_n}{2m_n c} \int \psi_n^* \mathbf{A}_e \mathbf{p}_n \psi_n dV_n - \frac{q_e^2}{2m_e c^2} \int \psi_e^* \mathbf{A}_n^2 \psi_e dV_e - \\ - \frac{q_n^2}{2m_n c^2} \int \psi_n^* \mathbf{A}_e^2 \psi_n dV_n.$$

Таким образом, выражение (6.62) для полной энергии атома принимает следующий вид:

$$E = \frac{E_e}{2m_e c^2} \int \psi_e^*(E_e - q_e \varphi_n) \psi_e dV_e + \frac{E_n}{2m_n c^2} \int \psi_n^*(E_n - q_n \varphi_e) \psi_n dV_n + \\ + \frac{1}{2m_e} \int \psi_e^*(\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2) \psi_e dV_e + \frac{1}{2m_n} \int \psi_n^*(\mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^2) \psi_n dV_n - \\ - \frac{q_e}{2m_e c} \int \psi_e^* \mathbf{A}_n \mathbf{p}_e \psi_e dV_e - \frac{q_n}{2m_n c} \int \psi_n^* \mathbf{A}_e \mathbf{p}_n \psi_n dV_n. \quad (6.64)$$

Его можно переписать в виде

$$E = \frac{E_e}{m_e c^2} \int \psi_e^*(E_e - q_e \varphi_n) \psi_e dV_e + \frac{E_n}{m_n c^2} \int \psi_n^*(E_n - q_n \varphi_e) \psi_n dV_n + \Delta E,$$

где

$$\Delta E = \frac{1}{2m_e c^2} \int \psi_e^* \left[c^2 \left(\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2 - \frac{q_e}{c} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}_e) \mathbf{p}_e \right) - E_e (E_e - q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e)) \right] \psi_e dV_e + \\ + \frac{1}{2m_n c^2} \int \psi_n^* \left[c^2 \left(\mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^2 - \frac{q_n}{c} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_n) \mathbf{p}_n \right) - E_n (E_n - q_n \varphi_e(\mathbf{r}_n)) \right] \psi_n dV_n.$$

Несложно видеть, что варьирование ΔE по функциям ψ_e^* и ψ_n^* приводит нас к системе уравнений, совпадающей с системой уравнений (6.57а, б). Следовательно,

$$E = E_e + E_n$$

и

$$\frac{1}{2m_e c^2} \int \psi_e^* \left[c^2 \left(\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2 - \frac{q_e}{c} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}_e) \mathbf{p}_e \right) - E_e (E_e - q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e)) \right] \psi_e dV_e + \\ + \frac{1}{2m_n c^2} \int \psi_n^* \left[c^2 \left(\mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^2 - \frac{q_n}{c} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_n) \mathbf{p}_n \right) - \right. \\ \left. - E_n (E_n - q_n \varphi_e(\mathbf{r}_n)) \right] \psi_n dV_n = 0. \quad (6.65)$$

Перепишем выражение (6.65) в следующем виде:

$$\frac{1}{2m_e c^2} \int \psi_e^* (c^2 \mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^4 - E_e^2) \psi_e dV_e + \\ + \frac{1}{2m_n c^2} \int \psi_n^* (c^2 \mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^4 - E_n^2) \psi_n dV_n + \\ + \frac{E_e q_e}{2m_e c^2} \int \psi_e^* \varphi_n(\mathbf{r}_e) \psi_e dV_e + \frac{E_n q_n}{2m_n c^2} \int \psi_n^* \varphi_e(\mathbf{r}_n) \psi_n dV_n - \\ - \frac{q_e}{2m_e c} \int \psi_e^* \mathbf{A}_n(\mathbf{r}_e) \mathbf{p}_e \psi_e dV_e - \frac{q_n}{2m_n c} \int \psi_n^* \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_n) \mathbf{p}_n \psi_n dV_n = 0. \quad (6.66)$$

Варьирование функционала (6.66) должно проводиться с учетом условия нормировки волновых функций, которое согласно (6.51) имеет вид

$$\frac{1}{m_a c^2} \int \psi_a^* (E_a - q_a \varphi_b) \psi_a dV_a = 1.$$

С учетом условия нормировки волновых функций функционал (6.66) преобразуется к следующему виду:

$$\int \psi_e^* \psi_n^* \left\{ -\frac{E_n \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_e - \frac{E_e \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_n + \frac{m_e^2 c^4 - E_e^2}{2m_e c^2} \frac{E_n}{m_n c^2} + \frac{m_n^2 c^4 - E_n^2}{2m_n c^2} \frac{E_e}{m_e c^2} + \right. \\ + \frac{E_e E_n}{m_e m_n c^4} \frac{q_e q_n}{r} - \frac{q_e^2 q_n^2}{2m_e m_n c^4} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) \frac{1}{r^2} - \\ \left. - \frac{q_e q_n}{2c^2} \frac{1}{r} \left(\mathbf{v}_n \frac{\mathbf{p}_e}{m_e} + \mathbf{v}_e \frac{\mathbf{p}_n}{m_n} \right) + H_h \right\} \psi_e \psi_n = 0, \quad (6.67)$$

где $r = |\mathbf{r}_{en}|$.

Варьирование выражения (6.67) по функции $\psi_e^* \psi_n^*$ приводит нас к уравнению для функции $\psi_e(\mathbf{r}_e) \psi_n(\mathbf{r}_n)$, оператор этого уравнения совпадает с выражением в фигурных скобках (6.67). Обсудим физический смысл отдельных слагаемых получившегося уравнения.

В пределе бесконечно тяжелого ядра, т. е. $m_e c^2 \ll m_n c^2$, первые шесть слагаемых в (6.67) преобразуются к следующему виду:

$$\begin{aligned} H_C = & -\frac{E_n \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_e - \frac{E_e \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_n + \frac{m_e^2 c^4 - E_e^2}{2m_e c^2} \frac{E_n}{m_n c^2} + \frac{m_n^2 c^4 - E_n^2}{2m_n c^2} \frac{E_e}{m_e c^2} + \\ & + \frac{E_e E_n}{m_e m_n c^4} \frac{q_e q_n}{r} - \frac{q_e^2 q_n^2}{2m_e m_n c^4} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) \frac{1}{r^2} \approx \\ \approx & -\frac{\hbar^2}{2m_e c^2} \Delta_e + \frac{m_e^2 c^4 - E_e^2}{2m_e c^2} + \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{q_e q_n}{r} - \frac{1}{2m_e c^2} \frac{q_e^2 q_n^2}{r^2} = \\ = & \frac{1}{2m_e c^2} \left[p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4 - (E_e - q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e))^2 \right]. \quad (6.68) \end{aligned}$$

Таким образом, несложно видеть, что первые шесть слагаемых описывают кинетическую энергию электрона и ядра атома и потенциальную энергию их кулоновского взаимодействия. В пределе бесконечно тяжелого ядра потенциальная энергия частицы совпадает с потенциальной энергией одиночной частицы, движущейся во внешнем кулоновском поле.

Обратимся к следующему слагаемому:

$$-\frac{q_e q_n}{2c^2} \frac{1}{r} \left(\mathbf{v}_n \frac{\mathbf{p}_e}{m_e} + \mathbf{v}_e \frac{\mathbf{p}_n}{m_n} \right).$$

Используя преобразования

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_n \mathbf{p}_e &= \frac{1}{r_{en}^2} \left\{ [\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_n] [\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_e] + (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_n) (\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_e) + \frac{i\hbar}{m_n} (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_e) + \frac{\hbar^2}{2m_n} \right\}, \\ \mathbf{v}_e \mathbf{p}_n &= \frac{1}{r_{en}^2} \left\{ [\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_e] [\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_n] + (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_e) (\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_n) - \frac{i\hbar}{m_e} (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_n) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \right\} \end{aligned}$$

и условие калибровки поля

$$\operatorname{div}_a \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) = -\frac{q_b}{c} \int \frac{\bar{\Psi}_b \mathbf{r}_{ab} \mathbf{v}_b \Psi_b}{r_{ab}^3} dV_b = 0,$$

это слагаемое преобразуется к следующему виду:

$$H_U = \frac{q_e q_n \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \frac{\mathbf{l}_e \mathbf{l}_n + \mathbf{l}_n \mathbf{l}_e - 1}{r^3}, \quad (6.69)$$

где

$$\hbar \mathbf{l}_e = [\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_e], \quad \hbar \mathbf{l}_n = [\mathbf{r}_{ne} \mathbf{p}_n]. \quad (6.70)$$

Отметим, что величина магнитного момента частицы, связанного с ее орбитальным движением, определяется выражением

$$\mu_a = \frac{q_a \hbar}{2m_a c},$$

поэтому выражение (6.69) пропорционально произведению магнитных моментов частицы и ядра $\mu_e \mu_n$. Следовательно, слагаемое (6.69) описывает взаимодействие магнитных моментов частицы и ядра, связанных с их орбитальным движением. Отметим, что последнее слагаемое в этом выражении связано с некоммутативностью операторов \mathbf{l}_e и \mathbf{l}_n . Как видно, энергия взаимодействия орбитальных моментов частиц качественно отличается от обсуждавшихся выше взаимодействий, поскольку выражение (6.69) пропорционально $1/r^3$.

Последнее слагаемое в уравнении (6.67) имеет вид

$$H_h = -\frac{q_n \varphi_e(\mathbf{r}_n)}{2m_e m_n c^4} (p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4 - E_e^2) - \frac{q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e)}{2m_e m_n c^4} (p_n^2 c^2 + m_n^2 c^4 - E_n^2) - \\ - \frac{E_e q_n^2}{2m_e m_n c^4} \frac{q_e}{r} \left(\varphi_e - \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{q_e}{r} \right) - \frac{E_n q_e^2}{2m_e m_n c^4} \frac{q_n}{r} \left(\varphi_n - \frac{E_n}{m_n c^2} \frac{q_n}{r} \right). \quad (6.71)$$

Как мы увидим позже, это слагаемое приводит к поправкам более высокого порядка по сравнению с рассмотренными выше членами.

6.3.6. Интегралы движения для водородоподобного мезоатома.

Итак, варьирование уравнения (6.67) по $\psi_e^*(\mathbf{r}_e) \psi_n^*(\mathbf{r}_n)$ приводит к следующему уравнению движения:

$$(H_C + H_U) \psi_e(\mathbf{r}_e) \psi_n(\mathbf{r}_n) = 0, \quad (6.72)$$

где мы опустили поправки более высокого порядка, определяемые выражением (6.71).

Введем радиус-вектор взаимного расположения частиц \mathbf{r} и радиус-вектор центра масс \mathbf{R} :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_n, \quad \mathbf{R} = \frac{E_e \mathbf{r}_e + E_n \mathbf{r}_n}{E_e + E_n}. \quad (6.73)$$

Оператор полного углового момента орбитального движения частиц имеет в этом случае вид

$$\hbar \mathbf{L} = [\mathbf{r}_e \mathbf{p}_e] + [\mathbf{r}_n \mathbf{p}_n] = [\mathbf{r} \mathbf{p}] + [\mathbf{R} \mathbf{P}], \quad (6.74)$$

где

$$\mathbf{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad \mathbf{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}.$$

Оператор уравнения (6.72) $H_C + H_U$ зависит лишь от радиуса-вектора \mathbf{r} , поэтому оператор полного импульса атома \mathbf{P} коммутирует с ним. Следовательно, полный импульс атома является сохраняющейся величиной.

Гамильтониан орбитального взаимодействия частиц (6.69) зависит от операторов угловых моментов $\hbar \mathbf{l}_e$ и $\hbar \mathbf{l}_n$, определяемых равенствами (6.70). Введем операторы

$$\hbar \mathbf{l}_1 = [\mathbf{r}\mathbf{p}], \quad \hbar \mathbf{l}_2 = [\mathbf{R}\mathbf{P}], \quad \hbar \mathbf{l}_3 = [\mathbf{r}\mathbf{P}], \quad (6.75)$$

тогда

$$\mathbf{l}_e = \mathbf{l}_1 + \frac{E_e}{E} \mathbf{l}_3, \quad \mathbf{l}_n = \mathbf{l}_1 - \frac{E_n}{E} \mathbf{l}_3.$$

Коммутационные соотношения для операторов \mathbf{L} и \mathbf{l}_i имеют вид

$$[L_\alpha, l_{i\beta}] = ie_{\alpha\beta\gamma} l_{i\gamma}. \quad (6.76)$$

Следовательно,

$$[L_\alpha, \mathbf{l}_e \mathbf{l}_n] = [L_\alpha, l_{e\beta}] l_{n\beta} + l_{e\beta} [L_\alpha, l_{n\beta}] = ie_{\alpha\beta\gamma} l_{e\beta} l_{n\gamma} - ie_{\alpha\gamma\beta} l_{e\gamma} l_{n\beta} = 0. \quad (6.77)$$

Поскольку

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \mathbf{l}_1^2, \quad \Delta_R = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) - \frac{1}{R^2} \mathbf{l}_2^2,$$

то оператор полного углового момента \mathbf{L} коммутирует с оператором уравнения (6.72)

$$[\mathbf{L}, H_C + H_U] = 0. \quad (6.78)$$

Следовательно, полный угловой момент атома является сохраняющейся величиной.

6.3.7. Уравнение для волновой функции мезоатома. Используя введенные выше определения, в операторе уравнения (6.72) можно выполнить следующие преобразования. Во-первых,

$$\frac{E_n}{m_n c^2} \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{p_n^2}{2m_n} = -\frac{\hbar^2 E}{2m_e m_n c^2} \left(\Delta_r + \frac{E_e E_n}{E^2} \Delta_R \right). \quad (6.79)$$

Во-вторых, поскольку оператор уравнения (6.72) коммутирует с операторами полного импульса и полного углового момента атома, то собственные состояния атома определяются величиной полного импульса атома \mathbf{P} , значениями его полного углового момента l и его проекции m . Положим, что атом является неподвижным: $\mathbf{P} = 0$. В этом случае

$$\mathbf{l}_e \mathbf{l}_n + \mathbf{l}_n \mathbf{l}_e - 1 \rightarrow \mathbf{l}_1^2,$$

поскольку последнее слагаемое в гамильтониане (6.69), как мы отметили выше, обусловлено некоммутативностью операторов \mathbf{l}_e и \mathbf{l}_n .

Окончательно, уравнение (6.72) принимает вид

$$(H_C + H_U) \psi_e \psi_n = 0, \quad (6.80)$$

где

$$H_C = -\frac{\hbar^2 E}{2m_e m_n c^2} \left(\Delta_r + \frac{E_e E_n}{E^2} \Delta_R \right) - \frac{E_e E_n}{m_e m_n c^4} \frac{Z e^2}{r} -$$

$$- \frac{1}{2m_e m_n c^4} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) \frac{Z^2 e^4}{r^2} + \frac{m_e^2 c^4 E_n + m_n^2 c^4 E_e - E_e E_n E}{2m_e m_n c^4}, \quad (6.81)$$

$$H_{II} = -\frac{4\mu_e \mu_n}{r^3} \mathbf{l}^2, \quad (6.82)$$

и величина орбитальных магнитных моментов частицы μ_e и ядра μ_n соответственно определяется выражением

$$\mu_e = -\frac{q_e \hbar}{2m_e c} = \frac{|e| \hbar}{2m_e c}, \quad \mu_n = \frac{q_n \hbar}{2m_n c} = \frac{Z|e| \hbar}{2m_n c}.$$

Оператор H_C есть оператор кинетической энергии движения частиц и их взаимодействия посредством кулоновского поля. Оператор H_{II} описывает взаимодействие магнитных моментов частицы и ядра, связанных с их орбитальным движением.

Поскольку оператор уравнения (6.80) является суммой двух операторов, один из которых зависит лишь от радиуса вектора \mathbf{r} взаимного расположения частиц, а второй зависит от координаты центра масс \mathbf{R} , то волновая функция $\psi_e(\mathbf{r}_e) \psi_n(\mathbf{r}_n)$ представима в виде следующего произведения:

$$\psi_e(\mathbf{r}_e) \psi_n(\mathbf{r}_n) = f(\mathbf{r}) g(\mathbf{R}).$$

В случае неподвижного атома оператор H_C принимает вид оператора задачи о движении одиночной частицы в кулоновском поле. Отличия состоят лишь в том, что в качестве коэффициентов уравнения фигурируют не только масса и энергия частицы, но также масса и энергия ядра. Решения уравнения

$$H_C f(\mathbf{r}) = 0$$

позволяют получить поправки к спектру частицы в кулоновском поле, связанные с конечностью массы и размеров ядра атома. Учет оператора H_{II} качественно меняет вид уравнения, и решения, полученные в предыдущей главе, перестают быть точными решениями уравнения

$$(H_C + H_{II}) f(\mathbf{r}) = 0.$$

Следует, однако, отметить, что, как следует из структуры оператора H_{II} , учет взаимодействия орбитальных магнитных моментов частицы и ядра приводит к поправкам лишь для уровней с $l > 0$. В энергию уровней с $l = 0$ указанное взаимодействие поправок не вносит. Поправки, связанные с оператором H_{II} , а также и поправки, обусловленные оператором H_h , определяемым выражением (6.71), могут быть вычислены по теории возмущений. Поскольку мезоатомы являются нестабильными атомарными системами, обладающими малым временем жизни, то расчет указанных поправок, как правило, не представляет практического интереса, поэтому в настоящей главе мы ограничимся

лишь приведенным выше общим анализом. Более подробно на расчете указанных поправок мы остановимся в гл. 15, посвященной расчету спектра состояний атома водорода.

6.4. Масса покоя в релятивистской теории

Оценки, приведенные в разделе 5.3, показывают, что энергия $A_{2\pi}$ -атома в состоянии ($n_2 = 0, l_2 = 0$) равна массе покоя электрона. Возникают естественные вопросы: является ли это совпадение случайным и как можно объяснить такое кардинальное изменение величины массы покоя частиц?

Учитывая комплексность волновой функции заряженных частиц, в разделе 4.4.2 мы записали уравнение КГФ в спинорном виде, введя волновую функцию

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi^*(x) \end{pmatrix}.$$

Анализ трансформационных свойств спинорной волновой функции показал, что спинорная волновая функция не отвечает требованиям релятивистской инвариантности, поэтому запись уравнения КГФ в спинорной форме не означает введения нового материального поля. Вместе с тем спинорная форма записи отражает наличие внутренних степеней свободы скалярного комплексного поля. Как следует из результатов приведенного выше анализа, эти две степени свободы можно связать с наличием двух зон состояний материального поля — положительно и отрицательно частотных. Волновая функция двухчастичной задачи является прямым произведением волновых функций взаимодействующих частиц. Согласно теореме сложения угловых моментов прямое произведение двух спиноров образует суперпозицию скалярной и четырехкомпонентной волновых функций. Биспинорная волновая функция является частным случаем четырехкомпонентных волновых функций и, как следует из рассмотрения, приведенного в гл. 3, отвечает материальным полям частиц со спином $1/2$. $A_{2\pi}$ -атом есть связанное состояние π^- - и π^+ -мезонов. В рамках развиваемых нами представлений, частица и зарядово-сопряженная частица представляет собой элементарные возбуждения двух различных материальных полей, поэтому, если волновую функцию частицы записать в вышеприведенном спинорном виде, то волновая функция зарядово-сопряженной частицы примет вид

$$\Psi_C(x) = \begin{pmatrix} \psi_C(x) \\ \psi_C^*(x) \end{pmatrix}.$$

Уравнение для волновой функции водородоподобного мезоатома, $\Psi_{2\pi} = \Psi \otimes \Psi_C$, как мы видели выше, отличается в общем случае от уравнения КГФ. Однако в нулевом приближении эти уравнения совпадают, поэтому обратимся вновь к уравнению КГФ.

6.4.1. Уравнения для амплитуды и фазы волновой функции.

Запишем волновую функцию уравнения КГФ в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) \exp[i\Phi(\mathbf{r}, t)/\hbar], \quad (6.83)$$

где $f(\mathbf{r}, t)$ — амплитуда волновой функции, а $\Phi(\mathbf{r}, t)$ — фаза, имеющая размерность действия. Подставляя (6.83) в (4.6) и (4.7), для плотности заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ получаем

$$\rho(\mathbf{r}, t) = -\frac{q_0}{m_0 c^2} (\dot{\Phi} + q_0 \varphi) f^2, \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{m_0} \left(\nabla \Phi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) f^2, \quad (6.84)$$

где $\dot{\Phi} = \partial \Phi / \partial t$.

Подставляя (6.83) в (4.3), получаем связанную систему уравнений для амплитуды и фазы волновой функции:

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \frac{1}{\hbar^2} \left[\left(\nabla \Phi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} (\dot{\Phi} + q_0 \varphi)^2 + m_0^2 c^2 \right] f, \quad (6.85a)$$

$$\Delta \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{c^2} (\dot{\Phi} + q_0 \varphi) \frac{\partial f^2}{\partial t} - \left(\nabla \Phi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \nabla f^2 \right]. \quad (6.85b)$$

Используя условие лоренцевской калибровки уравнение (6.85б) можно привести к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{q_0}{m_0 c^2} (\dot{\Phi} + q_0 \varphi) f^2 \right) + \operatorname{div} \left(\frac{q_0}{m_0} \left(\nabla \Phi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) f^2 \right) = 0.$$

Несложно видеть, что получившееся уравнение совпадает с уравнением непрерывности.

Как видно, преобразование (6.83) сводит линейное относительно ψ уравнение (4.3) к системе нелинейных связанных уравнений для амплитуды и фазы волновой функции (6.85а, б). Казалось бы, отсутствие строгих математических методов анализа и решения нелинейных уравнений ставит под вопрос эффективность такого преобразования. Возникающие сложности можно оценить, например, если обратиться к задаче поиска собственных состояний электрона в кулоновском поле. Вместо краевой задачи для линейного уравнения (5.51) мы получаем краевую задачу для системы нелинейных уравнений (6.85а, б). Эта задача не проста даже для численного решения. Однако, как мы покажем в следующем разделе, последующие преобразования уравнений (6.85а, б) позволяют свести их к уравнениям, которые становятся похожи на уравнения классической механики для точечной частицы. В этом и состоит эвристическая ценность указанного подхода.

В разделе 4.1.3 мы привели несколько эквивалентных выражений для энергии частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле. В частности, подставляя (6.83) в (4.48), получаем

$$E(t) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \dot{\Phi} (\dot{\Phi} + q_0 \varphi) f^2 dV - \frac{\hbar^2}{2m_0 c^2} \int \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\dot{f}}{f} \right) f^2 dV, \quad (6.86)$$

где $\dot{f} = \partial f / \partial t$. Для частицы, находящейся в стационарном состоянии с энергией E_n , когда $\Phi(\mathbf{r}, t) = -E_n t + \Phi_1(\mathbf{r})$ и $f(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r})$, получаем

$$E = E_n \frac{1}{m_0 c^2} \int (E_n - q_0 \varphi(\mathbf{r})) f_n^2(\mathbf{r}) dV.$$

Несложно видеть, что получившееся соотношение совпадает с выражением (4.45), приведенным ранее.

6.4.2. Уравнения квантовой магнитной гидродинамики.

Умножим обе части уравнения (6.85а) на $f(\mathbf{r}, t)$ и проинтегрируем по объему, тогда, используя определение энергии (6.86), после несложных преобразований получаем

$$E(t) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \left[\left(\nabla \Phi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 c^2 + m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \left(\frac{\Delta f}{f} - \frac{1}{c^2} \frac{\dot{f}}{f} \right) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\dot{f}}{f} \right) \right] f^2 dV + \int q_0 \varphi \rho dV. \quad (6.87)$$

В разделе 4.1.3 мы отмечали, что в стационарном случае энергия частицы является суммой потенциальной энергии частицы во внешнем поле и кинетической энергии.¹⁾ Второе слагаемое в (6.87) определяет потенциальную энергию частицы во внешнем поле, следовательно, первое слагаемое определяет энергию кинетического движения в нестационарном случае. Сравнивая (6.86) и (6.87), получаем также следующее соотношение

$$\begin{aligned} & - \int (\dot{\Phi} + q_0 \dot{\varphi}) \rho dV = \\ & = \frac{1}{m_0 c^2} \int \left[\left(\nabla \Phi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 c^2 + m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \left(\frac{\Delta f}{f} - \frac{1}{c^2} \frac{\dot{f}}{f} \right) \right] f^2 dV. \end{aligned} \quad (6.88)$$

Перейдем к дальнейшему преобразованию системы уравнений (6.85а, б). Уравнение (6.85а) можно переписать в следующем виде:

$$\left(\nabla \Phi - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + q_0 \dot{\varphi} \right)^2 + m_0^2 c^2 - \frac{\hbar^2}{f} \left(\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right) = 0. \quad (6.89)$$

Как видно, уравнение (6.89) имеет вид классического уравнения Гамильтона–Якоби для релятивистской частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, отличаясь от него наличием последнего слагаемого, пропорционального квадрату постоянной Планка. Базируясь на этой аналогии, мы можем положить, что фаза волновой функции Φ эквивалентна действию классической частицы. Далее, основываясь на этом предположении и используя аппарат классической механики, мы можем получить уравнения движения классиче-

¹⁾ Как мы отмечали в разделе 4.1.3, под кинетической энергией понимается энергия, включающая массу покоя частицы.

ской частицы, действие которой подчиняется уравнению (6.89). Следовательно, учитывая, что система уравнений (6.85а,б) полностью эквивалентна уравнению КГФ, мы, в принципе, можем установить взаимосвязь волновых уравнений квантовой механики и уравнений классической физики или по крайней мере получить интерпретацию квантово-механических явлений в рамках представлений классической физики.

Аналогия между уравнением (6.89) и уравнением Гамильтона–Якоби становится более полной, если ввести следующую переменную:

$$m = \sqrt{m_0^2 - \frac{\hbar^2}{c^2} \frac{1}{f} \left(\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right)}, \quad (6.90)$$

как видно, величина m имеет размерность массы и зависит от амплитуды волновой функции. В случае плоской волны $f(\mathbf{r}, t) = \text{const}$ и $m = m_0$. При движении частицы во внешних полях, когда амплитуда волновой функции становится пространственно неоднородной, m отличается от m_0 .

Обобщенный импульс связан с классическим действием следующим соотношением:

$$\mathbf{P} = \nabla \Phi. \quad (6.91)$$

Подставляя (6.90) и (6.91) в (6.88), получаем

$$- \int (\dot{\Phi} + q_0 \varphi) \rho dV = \frac{1}{m_0} \int (\mathbf{p}^2(\mathbf{r}, t) + m^2(\mathbf{r}, t) c^2) f^2 dV, \quad (6.92)$$

где импульс \mathbf{p} частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле, связан с обобщенным импульсом \mathbf{P} хорошо известным соотношением

$$\mathbf{p} = \mathbf{P} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}.$$

Таким образом, квантово-механическое среднее величины $-(\dot{\Phi} + q_0 \varphi)$ определяет кинетическую энергию движения частицы.

В уравнениях для классической частицы величина $-(\dot{\Phi} + q_0 \varphi)$ определяется из уравнения Гамильтона–Якоби и согласно (6.89) имеет вид

$$-(\dot{\Phi} + q_0 \varphi) = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2(\mathbf{r}, t) c^4}. \quad (6.93)$$

Используя определение (6.91), из (6.93) получаем

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = q_0 \mathbf{E} + \frac{q_0 c}{W} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{B}] - \frac{c^2}{W} (\mathbf{p} \nabla) \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 c^2}{2W} \nabla \left[\frac{1}{f} \left(\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right) \right], \quad (6.94)$$

где $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi$ и $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ векторы напряженности электрического и магнитного полей соответственно, а переменная W определяется выражением

$$W(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\mathbf{p}^2(\mathbf{r}, t) c^2 + m^2(\mathbf{r}, t) c^4}.$$

Уравнение (6.94) позволяет увидеть связь с уравнением движения классической релятивистской частицы. Чтобы сделать эту аналогию еще более очевидной, удобно ввести скорость частицы, определив ее следующим образом:

$$\mathbf{v} = \frac{c^2 \mathbf{p}}{W}. \quad (6.95)$$

В этом случае импульс частицы оказывается связанным со скоростью хорошо известным соотношением

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (6.96)$$

Подставляя выражения (6.95)–(6.90) в уравнение (6.94), получаем

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{p} = q_0 \mathbf{E} + \frac{q_0}{c} [\mathbf{v} \cdot \mathbf{B}] - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \cdot \nabla (mc^2). \quad (6.97)$$

Уравнение (6.97) имеет вид уравнения магнитной гидродинамики, где последний член играет роль внутреннего давления.

6.4.3. Масса покоя. С учетом (6.96) выражение для $W(\mathbf{r}, t)$ можно переписать в виде

$$W = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}.$$

Мы видим, что функция $W(\mathbf{r}, t)$, имеющая согласно определению смысл локальной энергии, связана с локальными переменными $m(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ соотношением, аналогичным соотношению, связывающему энергию точечной частицы E с ее массой покоя $m_0 c^2$.

Плотности заряда и тока, стоящие в правых частях уравнений для поля, также можно связать с функцией $W(\mathbf{r}, t)$. Подставляя выражение для $W(\mathbf{r}, t)$ в (6.84), получаем

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0 W(\mathbf{r}, t)}{m_0 c^2} f^2(\mathbf{r}, t),$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{m_0} \mathbf{p} f^2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v} \rho(\mathbf{r}, t).$$

Уравнение непрерывности принимает теперь вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (W f^2) + \operatorname{div} (\mathbf{v} W f^2) = 0.$$

Таким образом, мы видим, что уравнение КГФ может быть сведено к уравнениям релятивистской квантовой магнитной гидродинамики, которые в классическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ совпадают с соответствующими классическими уравнениями для точечной частицы. Переход к гидродинамическим уравнениям связан с введением локальных параметров, таких как эффективная масса $m(\mathbf{r}, t)$, энергия $W(\mathbf{r}, t)$ и ско-

рость $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, которые зависят от вида волновой функции частицы. Поясним смысл введенных параметров. Наиболее простую интерпретацию имеет локальная скорость, поскольку при движении частицы в пространственно неоднородном внешнем поле трансляционная скорость перемещения материального поля, естественно, различна в различных пространственных областях. Эта интерпретация применима как в случае точечной частицы, вероятность нахождения которой в точке \mathbf{r} определяется величиной $\rho(\mathbf{r}) dV$, так и в гидродинамическом смысле.

Интерпретацию физического смысла кинетической энергии $W(\mathbf{r}, t)$ можно получить, переписав уравнение (6.94) в следующем эквивалентном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = q_0 \mathbf{E} - \nabla W.$$

Следовательно, стационарное распределение плотности заряда частицы во внешнем поле, когда $\partial \mathbf{p} / \partial t = 0$, возникает в случае, когда сумма потенциальной энергии частицы во внешнем электростатическом поле $W_e = q_0 \varphi(\mathbf{r})$ и кинетической энергии $W(\mathbf{r})$ не зависит от координаты:

$$q_0 \varphi(\mathbf{r}) + W(\mathbf{r}) = \text{const},$$

что находится в полном соответствии с закономерностями классической физики.

Несколько более необычной является зависимость массы частицы от пространственного профиля волновой функции, а следовательно, и от координаты. Однако и здесь мы имеем прямую аналогию. Хорошо известно, что эффективная масса электрона в твердом теле зависит от направления его движения. Эффективная масса определяется из закона дисперсии, т. е. зависит от вида волновой функции электрона, определяющейся в свою очередь видом внутрикристаллического потенциала. Обратимся к уравнению (6.90). Как следует из этого уравнения, эффективная масса не зависит от координат и времени, если амплитуда волновой функции частицы удовлетворяет уравнению

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = k f,$$

где k — константа. Так, например, для плоской волны $k = 0$ и эффективная масса совпадает с массой покоя частицы. Для связанных состояний частицы, находящейся в стационарном внешнем поле, волновая функция должна убывать с ростом r . Это приводит к тому, что эффективная масса становится меньше массы покоя. Например, при $f(r) = \exp(-\kappa r) / r$ получаем: $k = \kappa^2$ и

$$m = \sqrt{m_0^2 - (\hbar \kappa / c)^2} = \frac{\hbar}{c} \sqrt{\kappa_C^2 - \kappa^2},$$

где $\kappa_C = m_0 / \hbar$. Как видно, масса покоя может существенно измениться только в случае, когда радиус экспоненциального спада волновой функции близок к комптоновской длине волны частицы λ_C . Расчеты,

приведенные в разделе 5.3.3, показывают, что именно такая ситуация имеет место для состояний с $n_2 = l_2$, когда

$$\kappa_{n_2, l_2=n_2} \approx \kappa_C \left/ \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{2(2l_2 + 1)^2} \right) \right.$$

Собственные значения энергии для этих состояний, как было показано в разделе 5.3.3, в α^{-1} раз меньше массы покоя частиц.

Замечание

Таким образом, результаты, полученные в гл. 4–6, наглядно свидетельствуют о том, что теория электромагнитных взаимодействий дает последовательное описание ядерных процессов, т.е. процессов, в которых масса и заряд частиц — продуктов реакции отличаются от массы и заряда исходных частиц.

Глава 7

ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ЧАСТИЦЫ С ПОЛУЦЕЛЫМ СПИНОМ

Анализ трансформационных свойств волновых функций по отношению к преобразованиям Лоренца, проведенный в гл. 3, показал, что генератором преобразований трех- и четырехмерных вращений для скалярной волновой функции является антисимметричный 4-тензор

$$J_{\mu\nu} = -i \left(x_\mu \frac{\partial}{\partial x_\nu} - x_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right) = \begin{pmatrix} 0 & l_3 & -l_2 & ik_1 \\ -l_3 & 0 & l_1 & ik_2 \\ l_2 & -l_1 & 0 & ik_3 \\ -ik_1 & -ik_2 & -ik_3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Пространственно-пространственные компоненты 4-тензора $J_{\mu\nu}$ имеют смысл компонент оператора углового момента \mathbf{I} :

$$\mathbf{I} = -i [\mathbf{r}\nabla],$$

а пространственно-временные компоненты тензора $J_{\mu\nu}$ образуют векторный оператор \mathbf{k} , имеющий вид

$$\mathbf{k} = -i \left(\frac{\mathbf{r}}{c} \frac{\partial}{\partial t} + ct \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right).$$

Векторный оператор \mathbf{k} обычно называется оператором «буста» («boost» three vector [20]), т. е. вспомогательным оператором, не имеющим непосредственного физического смысла. Указанная неэквивалентность пространственно-пространственных и пространственно-временных компонент 4-тензора $J_{\mu\nu}$ возникает лишь в рамках теорий, основанных на функции Лагранжа, линейной по оператору $p_4 = -i\hbar \partial/\partial t$. Действительно, оператор углового момента \mathbf{I} коммутирует с оператором p_4 , а оператор \mathbf{k} не коммутирует с ним. Вместе с тем анализ, проведенный в предыдущих двух главах, показал, что в то время как оператор \mathbf{I} связан с магнитным моментом частицы, оператор \mathbf{k} связан с электрическим моментом частицы. Следовательно, в рамках теорий, основанных на функции Лагранжа, линейной по оператору p_4 , частица может иметь сохраняющийся магнитный момент, но не может иметь сохраняющегося электрического момента. С другой стороны, оператор \mathbf{k} , так же как и оператор \mathbf{I} , коммутирует с оператором $p_\mu p_\mu$. Следовательно, функция Лагранжа свободной частицы, являющаяся квадратичной формой оператора 4-импульса, отвечает требованиям инвариантности не только относительно трехмерных вращений, но и относительно пространственно-временных вращений. В теории скалярных волновых полей указанная функция Лагранжа приводит к уравнению КГФ [8–10]. Оператор \mathbf{I}

связан в этом случае с магнитным моментом частицы, а оператор \mathbf{k} — с электрическим моментом.

Соображения релятивистской инвариантности показывают, что волновая функция спинорного поля должна быть четырехкомпонентной. В частности, этому условию удовлетворяет волновая функция дираковского поля, являющаяся биспинором. Биспинор может быть составлен, например, из двух спиноров, один из которых удовлетворяет правилам преобразования трехмерного спинора, а второй — комплексно сопряженного трехмерного спинора. Генератором преобразования формы биспинорной волновой функции при однородном преобразовании Лоренца является антисимметричный тензор

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -\frac{i}{4}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu),$$

составленный из матриц γ_μ , удовлетворяющих коммутационным соотношениям

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}.$$

В стандартном представлении матриц γ_μ ,

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -i\boldsymbol{\sigma} \\ i\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

компоненты тензора $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ имеют вид

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_3 & -\Sigma_2 & \alpha_1 \\ -\Sigma_3 & 0 & \Sigma_1 & \alpha_2 \\ \Sigma_2 & -\Sigma_1 & 0 & \alpha_3 \\ -\alpha_1 & -\alpha_2 & -\alpha_3 & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{-i}{2} [\boldsymbol{\gamma}], \quad \boldsymbol{\alpha} = i\gamma_4\boldsymbol{\gamma},$$

или, в стандартном представлении:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{-i}{2} [\boldsymbol{\gamma}] = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = i\gamma_4\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

Компоненты тензора $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, что и компоненты тензора $J_{\mu\nu}$.

Учитывая трансформационные свойства тензора $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$, можно предположить, что в функцию Лагранжа он будет входить в виде произведения с антисимметричным тензором электромагнитного поля $F_{\mu\nu}$. Теория частиц с полуцелым спином, основанная на использовании функции Лагранжа, являющейся квадратичной формой оператора 4-импульса и включающей взаимодействие вида $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}F_{\nu\mu}$, была предложена в работах [11, 12].

Квантовая механика, основанная на уравнениях, включающих вторую производную по времени, существенно отличается от теорий, ли-

нейных по оператору p_4 . Как мы видели на примере теории скалярных полей, изменяются как математический аппарат (например, условия нормировки и ортогональности волновых функций и т. д.), так и основные понятия теории (отрицательная вероятность, энергия состояния, которая может отличаться по знаку от собственного значения энергии, и т. д.). Изменение математического аппарата теории, естественно, приводит и к качественным изменениям представлений о структуре и свойствах частиц.

Наиболее принципиальное отличие теорий, основанных на использовании волновых уравнений со второй производной по времени, от теорий, основанных на использовании волновых уравнений, включающих лишь первую временную производную, состоит в том, что пространство состояний материального поля увеличивается вдвое. Как мы видели в предыдущих главах, пространство состояний скалярного материального поля представляет собой две гиперплоскости в четырехмерном пространстве. Эти две зоны состояний отделены друг от друга запрещенной зоной, которая для состояний сплошного спектра равна удвоенной массе покоя частицы. Состояния свободного скалярного материального поля, относящиеся к указанным двум зонам состояний, характеризуются одинаковыми инерционными свойствами (т. е. той же массой m_0), но противоположным зарядом ($q_0 \rightarrow -q_0$).

Анализ, проведенный в предыдущих главах, убедительно показал, что состояния положительно частотной зоны связаны с состояниями частицы, а состояния отрицательно частотной зоны отвечают новым состояниям материального поля — состояниям зеркальных частиц. Характерная особенность взаимодействия материи и зеркальной материи состоит в том, что оно сопровождается процессами с изменением числа частиц и для состояний сплошного спектра происходит лишь в полях крайне высокой напряженности, определяемой соотношением (5.69)

$$E_{mir} \approx 2m_0c^2/q_0\lambda_C = 2m_0^2c^3/q_0\hbar = m_0c^2/\mu_B,$$

где μ_B — магнетон Бора. Последнее соотношение показывает, что энергия электродипольного взаимодействия $\mu_B E_{mir}$ должна достигать величины, равной массе покоя частицы.

В сингулярных полях, как например в кулоновском поле, возникают одновременно связанные состояния как материи, так и зеркальной материи. В отличие от состояний сплошного спектра, заряд зеркальной частицы, находящейся в связанном состоянии, может как совпадать с зарядом частицы, так и быть противоположным ему. Радиус распределения заряда в глубокосвязанных состояниях зеркальной материи близок к классическому радиусу частицы, поэтому радиационные переходы между связанными состояниями частиц и зеркальных частиц приводят к целому ряду процессов в атомных ядрах, таких как K -захват, β^\pm -распад и т. д. Процессы взаимодействия материи и зеркальной материи, происходящие с участием связанных состояний, характеризуются теми же чертами, которые являются специфическими и для процессов

рассеяния. Во-первых, вероятность процесса растет с ростом заряда ядра атома, т.е. напряженности внутриатомного поля, и, во-вторых, эти процессы являются, как правило, многочастичными, т.е. число частиц продуктов реакции превышает число исходных частиц.

Итак, мы видим, что различия в математическом аппарате теории приводят к принципиальным физическим следствиям. Например, появление в теории зеркальных частиц, наряду с объяснением процессов, происходящих в атомных ядрах, позволяет также дать последовательную интерпретацию таких явлений, как «черные дыры» и «темная материя».

В случае частиц, обладающих внутренними степенями свободы, размерность пространства состояний увеличивается по сравнению с размерностью пространства состояний скалярной частицы, что приводит к появлению качественно новых состояний частиц. Последующие главы книги посвящены, в основном, квантовой механике частиц с полупуцелым спином.

7.1. Волновое уравнение

Пусть действие релятивистской частицы с полупуцелым спином, взаимодействующей с электромагнитным полем, имеет вид [11, 12]

$$S = \frac{1}{16\pi} \int F_{\mu\nu} F_{\nu\mu} dV dt - \frac{1}{2m_0} \int \left[\left(i\hbar \nabla_\mu \bar{\Psi} - \frac{q_0}{c} A_\mu \bar{\Psi} \right) \cdot \left(-i\hbar \nabla_\mu \Psi - \frac{q_0}{c} A_\mu \Psi \right) + m_0^2 c^2 \bar{\Psi} \Psi \right] dV dt + \frac{i\mu_0}{2} \int \bar{\Psi} \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu} \Psi dV dt \quad (7.1)$$

где m_0 , q_0 , μ_0 — масса, заряд и магнетон частицы (т.е. величина ее магнитного момента) соответственно; $F_{\mu\nu}$ — тензор электромагнитного поля:

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu},$$

γ_μ — четырехрядные квадратные матрицы, удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}.$$

Волновая функция в (7.1) является четырехкомпонентной:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}, t) \\ d(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_u(\mathbf{r}, t) \\ u_d(\mathbf{r}, t) \\ d_u(\mathbf{r}, t) \\ d_d(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix},$$

здесь $u = \begin{pmatrix} u_u \\ u_d \end{pmatrix}$ и $d = \begin{pmatrix} d_u \\ d_d \end{pmatrix}$ — трехмерные спиноры. Как мы отметили в гл. 3, волновая функция не является произвольной четырехкомпонентной функцией, а является биспинором, определяемым тем условием, что правила преобразования нижнего спинора d совпадают с правилами преобразования комплексно сопряженного верхнего спинора u^* . В качестве сопряженной функции $\bar{\Psi}$ в (7.1) выступает дираковски сопряженная волновая функция

$$\bar{\Psi} = \Psi^+ \gamma_4.$$

При таком выборе сопряженной функции действие является действительной величиной.

Действие (7.1) является релятивистски и калибровочно инвариантным. Действительно, первое слагаемое в (7.1), соответствующее действию свободного электромагнитного поля, имеет стандартный вид. Второе слагаемое является квадратичной формой оператора обобщенного 4-импульса частицы и совпадает по виду с действием релятивистской скалярной частицы. Последнее слагаемое описывает специфику взаимодействия спинорного материального поля с электромагнитным полем. Исходя из соображений релятивистской и калибровочной инвариантности, изложенных в конце гл. 3, оно является произведением двух антисимметричных 4-тензоров: генератора спинорного представления однородной группы Лоренца $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ и тензора электромагнитного поля $F_{\mu\nu}$. Отличительная черта действия (7.1) состоит в том, что оно позволяет ввести три независимые константы, характеризующие материальные свойства частицы: массу (m_0), заряд (q_0) и магнетон (μ_0).

Вариация действия (7.1) по $\bar{\Psi}$ приводит к следующему волновому уравнению для частицы:

$$\left[\frac{1}{2m_0} (P_\mu P_\mu + m_0^2 c^2) - \frac{i\mu_0}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu} \right] \Psi = 0, \quad (7.2)$$

где P_μ — оператор обобщенного 4-импульса:

$$P_\mu = p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{q_0}{c} A_\mu.$$

Уравнение (7.2) мы будем в дальнейшем называть квартионным уравнением, поскольку, как мы увидим в следующей главе, его характерной чертой является наличие четырех линейно независимых решений, которые мы свяжем с квартионами, как элементарными возбуждениями спинорного материального поля.

Вариация действия по A_μ приводит к следующим уравнениям для потенциалов электромагнитного поля:

$$\frac{\partial^2 A_\mu}{\partial x_\nu^2} - \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\nu} \right) = -\frac{4\pi}{c} j_\mu, \quad (7.3)$$

где

$$j_\mu = \frac{q_0}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\mu} \Psi - \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x_\mu} \right) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi} A_\mu \Psi \right] - \frac{ic\mu_0}{2} \frac{\partial}{\partial x_\nu} (\bar{\Psi} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu) \Psi). \quad (7.4)$$

4-вектор плотности тока j_μ удовлетворяет уравнению непрерывности

$$\frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} = 0. \quad (7.5)$$

Несложно видеть, что первое слагаемое в (7.4) связано с поступательными степенями свободы частицы, поскольку зависит от операторов пространственно-временных трансляций. Оно совпадает по виду с выражениями (3.40)–(3.41), определяющими 4-вектор плотности тока скалярной релятивистской частицы. Отличие состоит лишь в том, что сопряженной функцией в (7.4) является дираковски сопряженная волновая функция $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma_4$, а не эрмитово-сопряженная функция Ψ^\dagger . Второе слагаемое в плотности тока (7.4) связано с внутренними степенями свободы частицы, поскольку оно явно зависит от оператора $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$, являющегося генератором однородных преобразований Лоренца для спинорного поля.

7.2. Связь с уравнением Дирака

Воспользуемся тождеством

$$\gamma_\mu P_\mu \gamma_\nu P_\nu = P_\mu^2 + \frac{1}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu (P_\mu P_\nu - P_\nu P_\mu) = P_\mu^2 - \frac{iq_0 \hbar}{2c} \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu}.$$

В этом случае уравнение (7.2) может быть переписано в следующем тождественном виде:

$$(\gamma_\mu P_\mu + im_0 c) (\gamma_\mu P_\mu - im_0 c) \Psi = im_0 \left(\mu_0 - \frac{q_0 \hbar}{2m_0 c} \right) \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu} \Psi.$$

Как мы отмечали выше, константа μ_0 в уравнении для действия (7.1) определяет динамику внутренних степеней свободы частицы, связанных с наличием у частицы спина (т. е. собственного углового момента) и не связанных с ее перемещением в пространстве, аналогично тому, как магнетон Бора μ_B определяет связь магнитного момента с угловым моментом вращательного движения скалярной частицы как целого: $\mathbf{M} = \mu_B \psi^* \mathbf{1} \psi$ (см. формулу (6.18)). Из общих соображений ясно, что константы μ_0 и μ_B могут отличаться друг от друга, поскольку они связаны с разными степенями свободы движения частицы. Однако положим, что величина μ_0 равна величине магнитного момента μ_B :

$$\mu_0 = \mu_B = \frac{q_0 \hbar}{2m_0 c}, \quad (7.6)$$

как мы отмечали выше, μ_B является магнетонном Бора, когда речь идет об электроне и позитроне, или ядерным магнетонном μ_N , когда речь идет о нуклонах, и т. д. Однако для краткости мы будем в дальнейшем говорить лишь о магнетоне Бора. В этом случае уравнение (7.2) принимает вид

$$(\gamma_\mu P_\mu + im_0c)(\gamma_\mu P_\mu - im_0c)\Psi = 0. \quad (7.7)$$

Таким образом, мы видим, что в случае когда магнетон частицы равен магнетону Бора, любое решение уравнения Дирака

$$\left(\gamma_\mu \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{q_0}{c} A_\mu\right) - im_0c\right)\Psi = 0 \quad (7.8)$$

становится одновременно и решением уравнения (7.2). Обратное, однако, неверно, поскольку не любое решение уравнения (7.2) является одновременно решением уравнения (7.8).

Если воспользоваться предположением (7.6), то выражение (7.4) для 4-вектора плотности тока можно переписать в следующем тождественном виде:

$$j_\mu = \frac{q}{2m_0c} \left\{ \bar{\Psi} \gamma_\mu \cdot \left[\left(\gamma_\nu \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\nu} - \frac{q_0}{c} A_\nu \right) - im_0c \right) \Psi \right] - \left[\bar{\Psi} \left(\gamma_\nu \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\nu} + \frac{q_0}{c} A_\nu \right) - im_0c \right) \right] \cdot \gamma_\mu \Psi \right\}. \quad (7.9)$$

Отметим здесь для удобства, что уравнение, дираковски-сопряженное уравнению (7.8), имеет вид

$$\bar{\Psi} \left(\gamma_\mu \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{q_0}{c} A_\mu \right) + im_0c \right) = 0. \quad (7.10)$$

Подставляя уравнения (7.8) и (7.10) в правую часть выражения (7.9), для 4-вектора плотности тока получаем

$$j_\mu^{(D)} = icq_0 \bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi.$$

Следовательно, если частица подчиняется уравнению Дирака (7.8), то 4-вектор плотности тока (7.4) принимает вид выражения для 4-вектора плотности тока в теории Дирака:

$$j_\mu^{(D)} = (\mathbf{j}, ic\rho) = (cq_0\Psi^+ \boldsymbol{\alpha} \Psi, icq_0\Psi^+ \Psi).$$

Таким образом, переход от дифференциального уравнения второго порядка относительно пространственно-временных производных (7.2) к дифференциальному уравнению первого порядка относительно указанных производных не позволяет ввести магнетон частицы μ_0 как независимую материальную константу, поскольку даже в квадрированном уравнении Дирака (7.7) фигурирует лишь величина μ_B . Действительно, с учетом вышеприведенных формул уравнение (7.7) можно переписать в следующем виде

$$(P_\mu^2 + m_0^2c^2)\Psi = im_0\mu_B \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu} \Psi.$$

Итак, все решения уравнения Дирака являются частными решениями уравнения (7.2) для случая $\mu_0 = \mu_B$. Однако решения уравнения (7.2), даже в случае $\mu_0 = \mu_B$, не являются одновременно решениями уравнения Дирака. Ниже мы покажем, что и решения квадрированного уравнения Дирака не описывают всего спектра физических явлений, которые следуют из решения уравнения (7.2), поскольку даже незначительное отличие магнитного момента μ_0 от величины магнетона Бора μ_B приводит к качественным отличиям в характере взаимодействия частицы с внешними электромагнитными полями.

7.3. Векторы электрической и магнитной поляризации

Воспользуемся стандартным представлением матриц γ_μ . В этом случае уравнение (7.2) принимает следующий вид:

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi = \mu_0 (\Sigma \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \Psi. \quad (7.11)$$

Уравнение для сопряженной волновой функции $\bar{\Psi}$ имеет вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu + \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \bar{\Psi} = \mu_0 \bar{\Psi} (\Sigma \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}). \quad (7.12)$$

Умножив уравнение (7.11) слева на $\bar{\Psi}$, а уравнение (7.12) — справа на Ψ и взяв разность получившихся выражений, имеем

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_0 = 0,$$

где ρ_0 и \mathbf{j}_0 определяются выражениями

$$\mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi - \bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi} \mathbf{A} \Psi \right], \quad (7.13)$$

$$\rho_0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m_0 c^2} \left[-\frac{i\hbar}{2c} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi - \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi} \varphi \Psi \right]. \quad (7.14)$$

С другой стороны, пространственная и временная компоненты 4-вектора плотности тока (7.4) в стандартном представлении имеют вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi - \bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi} \mathbf{A} \Psi \right] + c \mu_0 \operatorname{rot} (\bar{\Psi} \Sigma \Psi) - i \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi), \quad (7.15)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{m_0 c} \left[-\frac{i\hbar}{2c} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi - \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi} \varphi \Psi \right] + i \mu_0 \nabla \cdot (\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi). \quad (7.16)$$

Сравнивая формулы (7.13)–(7.14) и (7.15)–(7.16), несложно видеть, что 4-вектор плотности тока (7.4), как мы уже отмечали выше, является суммой двух составляющих:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_t + \mathbf{j}_s, \quad \rho = \rho_t + \rho_s.$$

Первая часть определяется операторами пространственно-временных трансляций и связана с движением частицы как целого:

$$\mathbf{j}_t = q_0 \mathbf{j}_0, \quad \rho_t = q_0 \rho_0.$$

Эта часть плотности тока обусловлена преобразованием аргументов волновой функции, и потому выражения (7.13)–(7.14) внешне совпадают с выражением для 4-вектора плотности тока скалярной частицы.

Вторая часть обусловлена движением частицы по внутренним степеням свободы и определяется операторами, являющимися генераторами преобразования формы биспинорной волновой функции:

$$\mathbf{j}_s = c\mu_0 \operatorname{rot} (\bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi) - i\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\Psi \boldsymbol{\alpha} \Psi), \quad \rho_s = i\mu_0 \nabla (\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi). \quad (7.17)$$

Для краткости изложения мы будем называть эту часть плотности тока ориентационной или спиновой плотностью тока.

Важное обстоятельство состоит в том, что каждая из указанных частей по отдельности удовлетворяет уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_t = 0, \quad \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_s = 0. \quad (7.18)$$

Поскольку трансляционная часть плотности тока (7.15) совпадает по виду с трансляционной частью уравнения КГФ и удовлетворяет уравнению непрерывности (7.18), то мы можем воспользоваться результатами, полученными в разделе 6.1.3, и записать ее в виде

$$\mathbf{e}_i \mathbf{j}_t = \mathbf{e}_i \left(\frac{\partial \mathbf{P}_t}{\partial t} + c \operatorname{rot} \mathbf{M}_t \right) + \operatorname{div} (\mathbf{r} (\mathbf{e}_i \mathbf{j}_t)),$$

где векторы электрической \mathbf{P}_t и магнитной \mathbf{M}_t поляризации, связанные с трансляционным движением частицы, определены равенствами (6.17) и (6.18) соответственно. Напомним, что векторы \mathbf{e}_i являются здесь единичными векторами осей декартовой системы координат, которые введены для компактности записи последней формулы.

Отметим, что в стандартном представлении матриц γ_μ наглядно видно, что первое из ориентационных слагаемых в (7.11) имеет вид гамильтониана взаимодействия магнитного момента частицы $\boldsymbol{\mu} = \mu_0 \boldsymbol{\Sigma}$ с магнитным полем, а второе слагаемое имеет вид гамильтониана взаимодействия электрического момента частицы $\boldsymbol{\pi} = -i\mu_0 \boldsymbol{\alpha}$ с электрическим полем. Поэтому спиновую часть 4-вектора плотности тока (7.17), по аналогии с трансляционной, мы можем записать в следующем виде:

$$\mathbf{j}_s(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{P}_s}{\partial t} + c \operatorname{rot} \mathbf{M}_s, \quad (7.19)$$

$$\rho_s(\mathbf{r}, t) = -\operatorname{div} \mathbf{P}_s, \quad (7.20)$$

где векторы электрической \mathbf{P}_s и магнитной \mathbf{M}_s поляризации спинорного материального поля, характеризующие состояние внутренних степеней свободы движения частицы, имеют вид

$$\mathbf{P}_s(\mathbf{r}, t) = -i\mu_0 \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (7.21)$$

$$\mathbf{M}_s(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\Sigma} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (7.22)$$

Итак, мы видим, что в характере взаимодействия с электромагнитным полем спинорного материального поля появляются качественно новые черты по сравнению со случаем скалярного поля. Отклик материального поля на воздействие электромагнитных волн характеризуется векторами электрической и магнитной поляризации. Природа магнитной поляризации среды связана с пространственными вращениями материального поля, а природа электрической поляризации — с пространственно-временными вращениями, т. е. ускоренным движением частиц. Действительно, результаты анализа, проведенного в предыдущей главе, показывают, что векторы магнитной \mathbf{M} и электрической \mathbf{P} поляризации скалярного материального поля определяются выражениями

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = \mu_B \psi^* \mathbf{l} \psi + \text{э.с.}, \quad \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = i \mu_B \psi^* \mathbf{r} \frac{\partial}{\partial t} \psi + \text{э.с.}$$

При этом оператор углового момента $\mathbf{l} = [\mathbf{r} \nabla]$ является генератором преобразования пространственно-пространственных вращений, а оператор $\mathbf{k} = -i \left(\frac{\mathbf{r}}{c} \frac{\partial}{\partial t} + ct \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)$ является генератором преобразования пространственно-временных вращений. В случае скалярного материального поля указанные преобразования совершаются лишь над аргументами волновой функции частицы. Волновая функция частиц, описывающихся спинорными полями, является многокомпонентной, поэтому преобразования вращений сопровождаются не только преобразованием аргументов волновой функции, соответствующим трансляционным степеням свободы движения частицы, но и преобразованием формы волновой функции, т. е. изменением внутренней структуры состояния частицы. Генератором преобразования формы биспинорной волновой функции является тензор $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$. Как видно, пространственно-пространственные компоненты этого тензора определяют вектор магнитной поляризации спинорного материального поля \mathbf{M}_s , а пространственно-временные — вектор электрической поляризации \mathbf{P}_s .

Замечания

1. Проведенный выше анализ свойств уравнения КГФ и предварительный анализ уравнения для действия (7.1) и его следствий показывают, что в рамках теорий, основанных на волновых уравнениях, включающих вторую временную производную, достигается эквивалентность представлений о магнитной и электрической поляризации материального поля. Следует подчеркнуть, что все компоненты генератора преобразований вращений в четырехмерном пространстве приобретают физический смысл. Оператор \mathbf{k} перестает быть оператором «буста», т. е. оператором, не имеющим физического смысла, а становится оператором, соответствующим физически наблюдаемой величине — электрической поляризации материального поля.

2. Волновое уравнение, основанное на использовании действия (7.1), приводит к самосогласованному математическому описанию яв-

лений электрической и магнитной поляризации материального поля, связывая их с пространственно-временными и пространственно-пространственными преобразованиями как аргументов, так и формы биспинорной волновой функции.

3. Поскольку преобразования формы волновой функции являются точечными, то нет никаких априорных оснований полагать, что константа μ_0 в выражении для действия (7.1) должна совпадать с магнетонном Бора μ_B . Действительно, операции точечной симметрии определяют индивидуальные свойства частиц, в то время как магнетон Бора определяет инерциальные характеристики движения частиц во внешнем поле, которые, естественно, зависят лишь от массы и заряда частиц. Как мы увидим ниже, даже незначительное количественное различие констант μ_0 и μ_B приводит к целому ряду качественно новых физических явлений.

7.4. Тензор энергии-импульса и условие ортогональности собственных волновых функций

В настоящем разделе мы обсудим ряд математических свойств решений уравнения (7.2). Эти свойства во многом схожи с аналогичными свойствами уравнения (4.3), однако обладают определенной спецификой. Из общих соображений ясно, что классификация состояний спинорного материального поля отличается от классификации состояний скалярного поля. В основе классификации состояний материального поля лежат, в первую очередь, математические свойства решений волновых уравнений. Вместе с тем полное представление о физических свойствах частиц, находящихся в различных состояниях, может быть получено лишь из анализа задач взаимодействия. Тем не менее, обсуждая математический аппарат, который нам потребуется для дальнейшего изложения, мы будем пытаться обсудить и основы классификации состояний спинорного поля, используя, где это возможно, аналогию с состояниями скалярного поля.

7.4.1. Стационарная краевая задача. Как мы уже отмечали в предыдущих главах, важную роль в квантовой механике играют стационарные краевые задачи. С одной стороны, как мы видели, они дают наглядную иллюстрацию специфики свойств частиц, подчиняющихся тем или иным волновым уравнениям. С другой стороны, решения стационарных краевых задач используется в качестве базиса разложения решений нестационарных задач. Запишем уравнение (7.2) в следующем виде:

$$\left\{ \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (7.23)$$

и положим, что частица взаимодействует со стационарным внешним полем $A_\mu(x) = A_\mu^{(0)}(\mathbf{r})$. Волновые функции стационарных состояний частицы имеют вид

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \Psi_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t/\hbar)$$

и являются решениями задачи на собственные значения

$$\left\{ \frac{1}{2m_0 c^2} \left[c^2 \left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 + m_0^2 c^4 - (E_n - q_0 \varphi_0)^2 \right] - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_0 - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0) \right\} \Psi_n(\mathbf{r}) = 0, \quad (7.24)$$

Граничные условия для релятивистской задачи на собственные значения (7.24) близки к граничным условиям нерелятивистских задач квантовой механики. Для состояний дискретного спектра они означают, что волновая функция стремится к нулю при $r \rightarrow \infty$, для состояний сплошного спектра волновые функции должны удовлетворять условию равенства нулю потока через бесконечно удаленную поверхность, что накладывает определенные ограничения на асимптотический вид волновых функций при $r \rightarrow \infty$. В нерелятивистском случае обычно полагается, что граничные условия при $r \rightarrow 0$ состоят в требовании конечности волновой функции. В релятивистской квантовой механике собственные волновые функции, например, краевой задачи о движении частицы в кулоновском поле включают в общем случае и расходящиеся решения. Как отмечалось в гл. 5, ограничения на асимптотический вид волновой функции при $r \rightarrow 0$ определяются условиями конечности нормировочного интеграла.

Собственные волновые функции уравнения (7.24) являются ортонормированными. Действительно, если функция $\Psi_m(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению (7.24), то сопряженная волновая функция удовлетворяет уравнению

$$\bar{\Psi}_m(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 - \frac{1}{c^2} (E_m - U_0(\mathbf{r}))^2 \right) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 - \mu_0 \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_0 \right] = 0. \quad (7.25)$$

Умножая уравнение (7.25) справа на Ψ_n , а затем интегрируя по объему и перенося действие оператора \mathbf{p} с функции $\bar{\Psi}_m$ на функцию Ψ_n , получаем

$$(E_n - E_m) \frac{1}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_m \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U(\mathbf{r}) \right) \Psi_n dV = 0.$$

Таким образом, условие ортонормированности волновых функций невырожденных состояний имеет вид

$$\frac{1}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_m(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U(\mathbf{r}) \right) \Psi_n(\mathbf{r}) dV = \pm \delta_{nm}. \quad (7.26)$$

Как мы видели в предыдущих главах, при движении частицы в центрально-симметричном поле квантовое число уравнения КГФ является совокупностью четырех квантовых чисел: $n = (n_r, l, m, \lambda)$: радиального квантового числа n_r , углового момента l , его проекции m и частотности решения $E^{(\lambda)} = E^{(\pm)}$. Частица, описываемая биспинорной волновой функцией, имеет внутренние степени свободы, поэтому число квантовых чисел, определяющих состояние материального поля, возрастает, поскольку мы должны задать состояние по внутренним степеням свободы. Основываясь на аналогии между уравнениями (4.21) и (7.26), можно представить квантовое число n в следующем виде: $n = (\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda})$. В случае скалярного поля квантовое число λ определяет знак в правой части соотношения (7.26), в частности, в случае свободной частицы этот знак определяется принадлежностью состояния частицы к зоне положительно или отрицательно частотных решений. Как мы увидим позже, в случае спинорных полей знак в правой части (7.26) определяется не только принадлежностью состояния частицы к зоне положительно и отрицательно частотных решений, но зависит и от состояния частицы по внутренним степеням свободы. Необходимое количество компонент векторного квантового числа $\boldsymbol{\lambda}$ мы вскоре определим.

7.4.2. Разложение волновой функции нестационарного уравнения по собственным волновым функциям стационарной задачи. Волновую функцию нестационарного уравнения (7.23) мы можем представить в виде разложения по собственным волновым функциям краевой задачи (7.24). Действительно, пусть 4-потенциал поля задачи (7.23) имеет вид

$$A_\mu(x) = A_\mu^{(0)}(\mathbf{r}) + A_\mu^{(e)}(x),$$

где $A_\mu^{(0)}(\mathbf{r})$ представляет собой стационарный потенциал краевой задачи (7.24), а $A_\mu^{(e)}(x)$ — потенциал внешнего нестационарного поля. Поскольку нестационарное уравнение (7.23) является дифференциальным уравнением второго порядка по временной производной, то его общее решение зависит как от начального значения волновой функции, так и от ее производной. Поэтому, как мы отмечали в гл. 4, наряду с разложением волновой функции

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \Psi_n(\mathbf{r}, t) \quad (7.27a)$$

мы должны использовать разложение и временной производной волновой функции:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \sum_n E_n a_n(t) \Psi_n(\mathbf{r}, t). \quad (7.27\text{а})$$

Используя (7.27а, б), получаем

$$\bar{\Psi}_m \left(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - U_0 \Psi \right) - \left(i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}_m}{\partial t} + U_0 \bar{\Psi}_m \right) \Psi = \sum_n a_n \bar{\Psi}_m (E_n + E_m - 2U_0) \Psi_n.$$

Интегрируя обе части получившегося соотношения по объему и учитывая условие ортогональности (7.26), получаем

$$a_n(t) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\bar{\Psi}_n \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \bar{\Psi}_n}{\partial t} \Psi \right) - \bar{\Psi}_n U_0 \Psi \right] dV. \quad (7.27\text{в})$$

Таким образом, мы видим, что начальное значение коэффициентов $a_n(0)$ зависит как от начального вида волновой функции, так и от ее производной. Дальнейшая эволюция коэффициентов $a_n(t)$ определяется уравнениями, которые мы получим и обсудим позже, когда перейдем к рассмотрению взаимодействия атома с электромагнитным полем.

Отметим, что, так же как и в предыдущих главах, мы определяем условие нормировки и ортогональности волновых функций интегрированием по гиперплоскости $S_4 = V(t)$. Как мы отмечали в гл. 4, релятивистски инвариантное условие нормировки определяется интегрированием уравнения непрерывности по произвольной гиперплоскости. Однако в большинстве задач указанные различия несущественны, поскольку и частицы, и электромагнитное поле имеют конечную скорость распространения. Действительно, интегрируя уравнение непрерывности по объему V , получаем

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) dV = - \oint_S \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{S},$$

где S — поверхность, ограничивающая объем V , а \mathbf{j} и ρ определяются формулами (7.15) и (7.16) соответственно. Следовательно, закон сохранения заряда приводит нас к двум уравнениям:

$$q = \int_{V(r \rightarrow \infty)} \rho(\mathbf{r}, t) dV = \text{const}, \quad (7.28)$$

$$\oint_{S(r \rightarrow \infty)} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{S} = 0. \quad (7.29)$$

Волновые функции дискретного спектра состояний нормируются условием (7.28), а волновые функции непрерывного спектра — условием (7.29). Соответствующие примеры были приведены в гл. 4–6. Так же как и в случае скалярных полей, возможность интегрирования по

произвольной гиперплоскости представляет интерес лишь при анализе задач о взаимодействии атома с нестационарными электромагнитными полями. Таким образом, подставляя в (7.28) волновую функцию в виде

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \Psi_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t/\hbar)$$

и учитывая условие ортонормируемости (7.26), получаем

$$q = \frac{q_0}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_n(\mathbf{r}) (E_n - q_0 \varphi_0(\mathbf{r})) \Psi_n(\mathbf{r}) dV = \pm q_0.$$

Как мы говорили выше, знак в правой части последнего выражения определяется значениями компонент векторного квантового числа λ . Поскольку мы пока не определили этого квантового числа, разобьем пространство состояний $\Psi_n = \Psi_n^{(\lambda)}$ на два подпространства, $\Psi_n^{(\pm)}$, т. е. запишем выражение (7.26) в следующем предварительном виде:

$$\frac{1}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_n^{(\pm)}(\mathbf{r}) (E_n - q_0 \varphi_0(\mathbf{r})) \Psi_n^{(\pm)}(\mathbf{r}) dV = \pm 1.$$

Тогда, используя разложения (7.27), из закона сохранения заряда получаем

$$\sum_{\mathbf{n}} \left(|a_{\mathbf{n}}^{(+)}(t)|^2 - |a_{\mathbf{n}}^{(-)}(t)|^2 \right) = \sum_{\mathbf{n}} \left(|a_{\mathbf{n}}^{(+)}(0)|^2 - |a_{\mathbf{n}}^{(-)}(0)|^2 \right). \quad (7.30)$$

Таким образом, мы видим, что, так же как и в случае скалярных полей, сохраняющейся величиной является разность числа частиц в состояниях с положительной и отрицательной нормой собственных волновых функций. Уже в случае скалярных полей мы видели, что принадлежность к зоне положительно или отрицательно частотных решений, т. е. принадлежность состояния частицы к состоянию материи или зеркальной материи, не определяет знака нормы волновой функции, поскольку норма волновых функций связанных состояний зеркальной материи может быть как положительной, так и отрицательной. Увеличение размерности пространства состояний частиц, описываемых спинорными полями, приводит к тому, что двух терминов, *частица* и *зеркальная частица*, становится уже недостаточно для описания всех качественно различающихся состояний спинорного материального поля.

С учетом сказанного, казалось бы, условия нормировки спинорных волновых функций (7.26) должны были бы отличаться от условий нормировки скалярных волновых функций (4.21). Действительно, состояние спинорного материального поля характеризуется двумя принципиально новыми физическими параметрами: векторами электрической \mathbf{P}_s и магнитной \mathbf{M}_s поляризации. Однако приведенное выше условие нормировки по внешнему виду совпадает с условием нормировки скалярных волновых функций. Это обстоятельство имеет очень простое объяснение, состоящее в том, что уравнение непрерывности для спиновой части 4-вектора плотности тока (7.4) выполняется тождественно.

7.4.3. Тензор энергии-импульса. Действие (7.1) позволяет определить вид тензора энергии-импульса, который связан с функцией Лагранжа L следующим соотношением:

$$T_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\lambda}{\partial x_\mu} \frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial A_\lambda}{\partial x_\nu} \right)} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\mu} \frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\nu} \right)} + \frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x_\nu} \right)} \frac{\partial \Psi}{\partial x_\mu} - L \delta_{\mu\nu}. \quad (7.31)$$

Используя (7.31), для тензора энергии-импульса получаем

$$\begin{aligned} T_{\mu\nu} = & \frac{1}{4\pi} \frac{\partial A_\lambda}{\partial x_\mu} F_{\lambda\nu} - \frac{1}{16\pi} F_{\alpha\beta} F_{\beta\alpha} \delta_{\mu\nu} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\mu} \frac{\partial \Psi}{\partial x_\nu} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\nu} \frac{\partial \Psi}{\partial x_\mu} \right) + \\ & + \frac{iq_0\hbar}{2m_0c} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\mu} A_\nu \Psi - \bar{\Psi} A_\nu \frac{\partial \Psi}{\partial x_\mu} \right) + \\ & + \frac{1}{2m_0} \left[\left(i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\lambda} - \frac{q_0}{c} A_\lambda \bar{\Psi} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x_\lambda} - \frac{q_0}{c} A_\lambda \Psi \right) + m_0^2 c^2 \bar{\Psi} \Psi \right] \delta_{\mu\nu} + \\ & + \frac{i\mu}{2} \left[\bar{\Psi} \frac{\partial A_\lambda}{\partial x_\mu} (\gamma_{\lambda\lambda} \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\lambda) \Psi - \bar{\Psi} \gamma_\alpha \gamma_\beta F_{\beta\alpha} \Psi \delta_{\mu\nu} \right]. \quad (7.32) \end{aligned}$$

В частности, функция Гамильтона H , определяющая плотность энергии электромагнитного и материального полей, имеет вид

$$\begin{aligned} H = T_{44} = & \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi)^2 + \mathbf{B}^2 \right] + \frac{1}{2m_0} \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{q_0^2}{c^2} \bar{\Psi} \varphi^2 \Psi + \right. \\ & + \left(i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + m_0^2 c^2 \bar{\Psi} \Psi \left. \right] - \\ & - \mu_0 (i\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \nabla \varphi \Psi + \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} \Psi). \quad (7.33) \end{aligned}$$

Как видно, плотность энергии, так же как и в случае скалярной частицы, является суммой двух слагаемых, одно из которых зависит от потенциалов электромагнитного поля и не зависит явно от волновой функции частицы, а второе зависит явно от волновой функции материального поля. Поэтому, по аналогии со случаем скалярной частицы, представим функцию Гамильтона в виде суммы двух слагаемых: $H = w_1 + w_2$, где

$$w_1(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi)^2 + \mathbf{B}^2 \right], \quad (7.34a)$$

$$\begin{aligned} w_2(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{2m_0} \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{q_0^2}{c^2} \bar{\Psi} \varphi^2 \Psi + \right. \\ & + \left(i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + m_0^2 c^2 \bar{\Psi} \Psi \left. \right] - \\ & - \mu_0 (i\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \nabla \varphi \Psi + \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} \Psi). \quad (7.34b) \end{aligned}$$

Уравнения, определяющие эволюцию $w_{1,2}(\mathbf{r}, t)$, следуют из волновых уравнений для электромагнитного и материального полей.

Поскольку свойства электромагнитного поля не зависят от того, каким типом частиц оно порождено, то выражение для плотности энергии $w_1(\mathbf{r}, t)$ совпадает с аналогичным выражением, полученным ранее при обсуждении теории скалярных полей. Используя результаты раздела 4.1.3, для скорости изменения $w_1(\mathbf{r}, t)$ получаем

$$\frac{\partial w_1}{\partial t} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} - \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rho + \frac{1}{4\pi} \operatorname{div} \left(\left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{B} \right] - \frac{\partial \varphi}{\partial t} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right) \right), \quad (7.35)$$

где \mathbf{j} и ρ определяются теперь формулами (7.15) и (7.16) соответственно. Напомним, что $w_1(\mathbf{r}, t)$ может быть преобразовано к следующему виду:

$$w_1(\mathbf{r}, t) = w_{em} - \varphi \rho + \frac{1}{4\pi} \operatorname{div}(\varphi \mathbf{E}),$$

где w_{em} — плотность энергии электромагнитного поля,

$$w_{em} = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2),$$

а уравнение для w_{em} , следующее из (7.35), имеет видуравнения Пойнтинга:

$$\frac{1}{8\pi} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = -\mathbf{E} \mathbf{j} - \frac{c}{4\pi} \operatorname{div}[\mathbf{E} \mathbf{B}]. \quad (7.36)$$

Плотность энергии w_2 отличается от аналогичного выражения для скалярной частицы наличием членов, определяющих взаимодействие собственного электрического и магнитного моментов частицы с внешним электромагнитным полем. Уравнение, определяющее эволюцию w_2 , может быть получено из уравнения для волновой функции материального поля (7.2) аналогично тому, как это было сделано в случае скалярной частицы. Умножим обе части уравнения (7.11) на $\partial \bar{\Psi} / \partial t$, а обе части уравнения (7.12) — на $\partial \Psi / \partial t$. Складывая получившиеся выражения, получаем

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{2m_0 c^2} \left(\hbar^2 \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - q_0^2 \varphi^2 \bar{\Psi} \Psi \right) + \right. \\ & \quad + \frac{1}{2m_0} \left[\left(i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + m_0^2 c^2 \bar{\Psi} \Psi \right] - \\ & \quad \left. - i\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \nabla \varphi \Psi - \mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} \Psi \right\} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rho + \\ & \quad + \operatorname{div} \left\{ \frac{i\hbar}{2m_0} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \right. \\ & \quad \left. - i\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mu_0 \left[\bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right] \right\}. \quad (7.37) \end{aligned}$$

Как видно, левая часть получившегося выражения совпадает с временной производной от плотности энергии w_2 , определяющейся выражением (7.34б). В целях интерпретации физического смысла плотности энергии w_2 воспользуемся приемом, использованным в гл. 4. Для этого запишем уравнение (7.2) в виде

$$\left(\widehat{K} - \widehat{T} + \widehat{Z}_{PM}\right)\Psi = 0, \quad (7.38)$$

где операторы \widehat{K} и \widehat{T} совпадают с соответствующими операторами, введенными в гл. 4 (см. формулу (4.32)):

$$\widehat{K} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}\right)^2 + m_0^2 c^2 \right], \quad \widehat{T} = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right)^2,$$

а оператор \widehat{Z}_{PM} , связанный с внутренними степенями свободы движения частицы, имеет вид

$$\widehat{Z}_{PM} = -\frac{i\mu_0}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu}.$$

В стандартном представлении матриц γ_μ оператор \widehat{T} имеет вид

$$\widehat{Z}_{PM} = -\mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}).$$

После несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0} \left[\left(i\hbar \boldsymbol{\nabla} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot \left(-i\hbar \boldsymbol{\nabla} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + m_0^2 c^2 \bar{\Psi} \Psi \right] = \\ = \frac{1}{2} \left(\bar{\Psi} \cdot \widehat{K} \Psi + \widehat{K}^+ \bar{\Psi} \right) + \frac{\hbar^2}{4m_0} \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\bar{\Psi} \boldsymbol{\nabla} \Psi + \boldsymbol{\nabla} \bar{\Psi} \cdot \Psi \right), \quad (7.39a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0 c^2} \left(\hbar^2 \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - q_0^2 \varphi^2 \bar{\Psi} \Psi \right) = \\ = \frac{1}{2} \left(\bar{\Psi} \widehat{T} \Psi + \widehat{T}^+ \bar{\Psi} \cdot \Psi \right) + \varphi \rho_t + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi \right), \quad (7.39b) \end{aligned}$$

где ρ_t — трансляционная часть плотности тока (7.16). Используя (7.38) и (7.25), выражение (7.34б) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} w_2 = \frac{1}{2m_0 c^2} \left[\hbar^2 \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{1}{2} \bar{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial t^2} \Psi \right) - i\hbar q_0 \varphi \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi \right) \right] + \\ + i \frac{\mu_0}{c} \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \Psi + \frac{\hbar^2}{4m_0} \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} \bar{\Psi} \cdot \Psi + \bar{\Psi} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi \right). \quad (7.40) \end{aligned}$$

За исключением слагаемого, зависящего от внутренних степеней свободы движения частицы, получившееся выражение совпадает по виду с аналогичным выражением (4.46) для случая скалярной частицы. Так

же как и в случае скалярной частицы, последнее слагаемое в (7.40), являющееся полной дивергенцией, может быть перенесено в правую часть уравнения (7.37).

Подставляя разложения волновой функции (7.27а, б) и интегрируя по объему, получаем

$$E_p = \int w_2 dV = \sum_n |a_n(t)|^2 \frac{E_n}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_n (E_n - q_0 \varphi) \Psi_n dV + \\ + \sum_{n,m} \left[\frac{i\hbar}{4m_0 c^2} \left(E_m a_n^* \frac{da_m}{dt} - E_n \frac{da_n^*}{dt} a_m \right) \int \bar{\Psi}_n \Psi_m dV + \right. \\ \left. + i \frac{\mu_0}{c} a_n^* a_m \int \bar{\Psi}_n \boldsymbol{\alpha} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \Psi_m dV \right] \exp \left(i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t \right).$$

При выводе последнего выражения мы учли, что граничные условия, которые обычно используются при решении краевых задач для собственных функций как дискретного, так и непрерывного спектра, обеспечивают равенство нулю объемного интеграла от последнего слагаемого в (7.40).

В стационарном случае энергия частицы, находящейся в собственном состоянии с волновой функцией $\Psi_n(\mathbf{r})$, определяется выражением

$$E_p^{(n)} = \frac{E_n}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_n (E_n - q_0 \varphi) \Psi_n dV.$$

Как видно, последнее выражение совпадает с энергией скалярной частицы. Вводя оператор $\hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$, выражение для энергии частицы можно записать в виде, аналогичном выражению (4.48) для скалярной частицы

$$E_p = \frac{1}{2m_0 c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \cdot \hat{E} \Psi - \bar{\Psi} \cdot \hat{E} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - q_0 \varphi \bar{\Psi} \cdot \hat{E} \Psi \right] dV + \\ + \frac{1}{2m_0 c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\hat{E}^+ \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \cdot \Psi - \hat{E}^+ \bar{\Psi} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - q_0 \varphi \hat{E}^+ \bar{\Psi} \cdot \Psi \right] dV + \\ + i \frac{\mu_0}{c} \int \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \Psi dV. \quad (7.41)$$

В стационарном внешнем поле последнее выражение совпадает по виду с выражением для энергии скалярной частицы. Таким образом, выражение (7.40) можно записать в следующем виде

$$w_2(\mathbf{r}, t) = w_p(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla \cdot (\nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi + \bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi),$$

где w_p — плотность энергии материального поля, определяющаяся подынтегральным выражением в (7.41).

Соотношения (7.39а, б) позволяют также получить следующее выражение для плотности энергии w_2 :

$$w_2 = \bar{\Psi} \cdot \left(\hat{K} + \hat{Z}_{PM} \right) \Psi + \bar{\Psi} \left(\hat{K}^+ + \hat{Z}_{PM}^+ \right) \cdot \Psi + \varphi \rho + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{P}) + \mathbf{P} \mathbf{E} + \\ + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi \right) + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \nabla \cdot (\bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi + \nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi), \quad (7.42)$$

где $\hat{Z}_{PM}^+ = \gamma_4^{-1} \hat{Z}_{PM}^+ \gamma_4$ — сопряженный оператор (см. раздел 7.5). Как видно, слагаемые выражения (7.42), не зависящие от внутренних степеней свободы движения частицы, совпадают по виду с соответствующими слагаемыми выражения (4.43) для скалярного материального поля.

Используя уравнение непрерывности (7.5), получаем

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rho = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho) + \varphi \operatorname{div} \mathbf{j} = \mathbf{E} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho) + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{j}).$$

Подстановка последнего соотношения в правую часть уравнения (7.37) приводит его к следующему виду:

$$\frac{\partial w_2}{\partial t} = \mathbf{E} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho) - \operatorname{div} \mathbf{J}_1 + c \operatorname{div}[\mathbf{E} \mathbf{M}] + \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div}(\varphi \mathbf{P}), \quad (7.43)$$

где векторы \mathbf{P} и \mathbf{M} определяются равенствами (7.21) и (7.22) соответственно, и мы ввели следующее обозначение:

$$\mathbf{J}_1 = \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right) \bar{\Psi} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Psi - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right) \Psi \right].$$

Складывая (7.35) и (7.43), получаем

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{J}_1 - \frac{c}{4\pi} \operatorname{div}[\mathbf{E}(\mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M})] + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div}(\varphi(\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P})). \quad (7.44)$$

Сравнивая получившееся уравнение с уравнением (4.52) для скалярной частицы, несложно видеть, что уравнение (7.44) обобщает уравнение (4.52) на случай частицы, обладающей собственным магнитным и электрическим моментами. Действительно, введем следующие обозначения:

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}, \quad (7.45)$$

тогда (7.44) принимает вид

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{J}_1 - \frac{c}{4\pi} \operatorname{div}[\mathbf{E} \mathbf{H}] + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div}(\varphi \mathbf{D}).$$

Как видно, обобщение состоит в том, что поток энергии электромагнитного поля определяется теперь выражением

$$\mathbf{J}_f = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \mathbf{H}],$$

т. е. совпадает с выражением классической электродинамики для плотности потока энергии электромагнитного поля в среде. При этом вектор \mathbf{H} является вектором напряженности магнитного поля, а век-

тор \mathbf{D} — вектором индукции электрического поля. Таким образом, соотношения (7.45) дают дополнительные подтверждения того, что введенные выше векторы \mathbf{P} и \mathbf{M} имеют смысл векторов электрической и магнитной поляризации материального поля, обусловленных наличием внутренних степеней свободы движения частицы.

С учетом вышеприведенных преобразований выражение для функции Гамильтона H принимает вид

$$H = w_{em} + w_p - \varphi\rho + \frac{1}{4\pi} \operatorname{div}(\varphi\mathbf{E}) + \frac{\hbar^2}{4m_0} \nabla \cdot (\bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi + \nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi).$$

Следовательно, из уравнения (7.44) получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (w_{em} + w_p - \varphi\rho_t + i\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \nabla \varphi \Psi) = \\ = -\frac{c}{4\pi} \operatorname{div} [\mathbf{E} (\mathbf{B} - 4\pi\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi)] - \operatorname{div} \mathbf{J}, \end{aligned} \quad (7.46)$$

где

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \frac{\hbar^2}{4m_0} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi + \nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi).$$

Интегрируя обе части уравнения (7.46) по пространственному объему V , получаем

$$\frac{d}{dt} \int_V (w_{em} + w_p - \varphi\rho_t + i\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \nabla \varphi \Psi) dV = -\frac{c}{4\pi} \oint_S [\mathbf{E}\mathbf{H}] d\mathbf{S} - \oint_S \mathbf{J} d\mathbf{S},$$

где S — поверхность, ограничивающая объем V . Следовательно, если поток энергии электромагнитного $\frac{c}{4\pi} \oint_S [\mathbf{E}\mathbf{H}] d\mathbf{S}$ и материального $\oint_S \mathbf{J} d\mathbf{S}$ полей через границу трехмерного объема V равен нулю, то сохраняющейся величиной является полная энергия в объеме V :

$$E(t) = \int_V (w_{em} + w_p - \varphi\rho_t + i\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \nabla \varphi \Psi) dV = \text{const}. \quad (7.47)$$

Учитывая (7.42), для полной энергии получаем

$$\begin{aligned} E(t) = \int_V w_{em} dV + \int_V (\bar{\Psi} \cdot (\hat{K} - \mu_0 \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}) \Psi + \bar{\Psi} (\hat{K}^+ - \mu_0 \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}) \cdot \Psi) dV + \\ + i\mu_0 \int_V \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E} \Psi dV + \frac{\hbar^2}{4m_0 c^2} \frac{d}{dt} \int_V \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi \right) dV. \end{aligned} \quad (7.48)$$

Таким образом, полную энергию системы, состоящей из электромагнитного поля и материального поля спинорных частиц, можно представить в виде следующих составляющих.

1. Энергия электромагнитного поля

$$E_{em} = \int_V w_{em} dV,$$

которая, естественно, не зависит от типа материального поля, поскольку действие (7.1) отличается от действия скалярной релятивистской частицы лишь слагаемыми, зависящими от волновой функции частицы.

2. Второе слагаемое в (7.48) определяет кинетическую энергию частицы, движущейся в магнитном поле:

$$E_K = \int_V \left(\bar{\Psi} \cdot \left(\hat{K} - \mu_0 \Sigma \mathbf{B} \right) \Psi + \bar{\Psi} \left(\hat{K}^+ - \mu_0 \Sigma \mathbf{B} \right) \cdot \Psi \right) dV.$$

Забегая вперед, отметим, что такая структура выражения для кинетической энергии частицы в магнитном поле обусловлена тем, что масса покоя частицы в магнитном поле отличается от массы покоя свободной частицы. Более детально мы обсудим эти вопросы в гл. 10, где будет приведен анализ задачи о движении частицы в стационарном магнитном поле.

3. Третье слагаемое в (7.48) определяет энергию взаимодействия электромагнитного поля с вектором электрической поляризации спинорного материального поля:

$$E_P = i\mu_0 \int_V \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E} \Psi dV = - \int_V \mathbf{P} \mathbf{E} dV.$$

В свете приведенных выше обсуждений появление этого слагаемого выглядит вполне закономерным.

4. Последнее слагаемое в (7.48),

$$E_{ex}(t) = \frac{\hbar^2}{4m_0c^2} \frac{d}{dt} \int_V \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi \right) dV,$$

совпадает по виду с аналогичным слагаемым в выражении (4.56), поэтому мы не будем здесь повторять его интерпретацию.

Таким образом, мы видим, что выражения для полной энергии системы, состоящей из электромагнитного поля и материального спинорного (7.48) или скалярного (4.56) полей, находятся в полном соответствии друг с другом, а также в соответствии с представлениями классической электродинамики.

7.5. Операторы

Общее определение операторов было дано в разделе 4.2. Естественно, оно остается справедливым и применительно к теории спинорных материальных полей. Однако в теории спинорных полей появляются новые операторы, которые действуют на внутренние степени свободы

движения частицы и являются генераторами преобразования формы биспинорной волновой функции, поэтому в настоящем разделе мы еще раз кратко остановимся на этом вопросе.

В теории волновых материальных уравнений, линейных по оператору p_4 , основную роль играют билинейные комбинации волновых функций с операторами вида $\psi^* \hat{L} \psi$, пространственные интегралы от которых определяют квантово-механические средние: $\langle \hat{L} \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV$. Как было показано в разделе 4.2, в теории волновых полей, подчиняющихся уравнениям со второй производной по времени, квантово-механические средние определяются пространственными интегралами от билинейных комбинаций волновых функций и их производных вида $\psi^* \hat{L} \partial \psi / \partial t$, однако и билинейные комбинации волновых функций с операторами также играют важную роль. Такое расширение служебных функций операторов вполне естественно, поскольку в рамках теорий, квадратичных по оператору p_4 , волновая функция не определяет состояния поля в данный момент времени, необходимо задание и временной производной от волновой функции.

7.5.1. Билинейные комбинации. В гл. 3 были рассмотрены преобразования симметрии для скалярных и биспинорных волновых функций при ортогональных преобразованиях координат. В случае релятивистской частицы, описываемой скалярной волновой функцией, генераторами этих преобразований являются 4-вектор p_μ , являющийся оператором пространственно-временных сдвигов, и 4-тензор $J_{\mu\nu} = (\mathbf{1}, i\mathbf{k})$, определяющий оператор углового момента $\mathbf{1}$, связанный с преобразованиями трехмерных вращений, и оператор \mathbf{k} , связанный с пространственно-временными вращениями. Указанных операторов достаточно для полного описания движения скалярной частицы, т.е. для описания движения частицы во внешних электромагнитных полях или взаимодействия частиц посредством электромагнитного поля. Действительно, 4-вектор плотности тока частицы $j_\mu(x)$ определяется билинейной комбинацией волновых функций следующего вида: $\psi^*(x) \left(p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu \right) \psi(x)$. О связи матричных элементов $j_\mu(x)$ с матричными элементами $\psi_n^* \mathbf{1} \psi_m$ и $\psi_n^* \mathbf{k} \psi_m$ мы говорили в гл. 6. Рассчитывая $j_\mu(x)$, мы можем определить напряженность электрического и магнитного полей, создаваемых движением частицы, а следовательно, мы можем последовательным образом описывать взаимодействие частиц посредством электромагнитного поля.

Волновая функция частицы, обладающей внутренними степенями свободы, является многокомпонентной. В этом случае группа преобразований Лоренца, наряду с преобразованием координат, включает также преобразования формы волновой функции, обусловленные ее многокомпонентностью. Для частицы, описываемой биспинорной волновой функцией, трансляционная часть 4-вектора плотности тока $j_\mu^{(e)}(x)$

также является симметризованной билинейной комбинацией волновых функций с оператором 4-импульса:

$$j_{\mu}^{(e)}(x) = \frac{q_0}{2m_0} (P_{\mu}^* \bar{\Psi} \cdot \Psi + \bar{\Psi} \cdot P_{\mu} \Psi), \quad (7.49)$$

где $P_{\mu} = p_{\mu} - \frac{q_0}{c} A_{\mu}$. Последнее выражение можно переписать в симметричной форме

$$j_{\mu}^{(e)}(x) = \frac{q_0}{2m_0} (P_{\mu}^* \bar{\Psi} \cdot \Psi + \bar{\Psi} \cdot P_{\mu} \Psi) = \frac{q_0}{2m_0} (\bar{\Psi} P_{\mu}^+ \cdot \Psi + \bar{\Psi} \cdot P_{\mu} \Psi),$$

где полагается, что оператор действует на волновую функцию, стоящую по одну с ним сторону от точки.

Преобразования формы, связанные с внутренними степенями свободы движения частицы, включают лишь преобразования четырехмерных вращений, поскольку начало системы отсчета в этом случае связано с частицей. Генератором этих преобразований является антисимметричный 4-тензор

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -\frac{i}{4} (\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} - \gamma_{\nu} \gamma_{\mu}) = (\mathbf{\Sigma}, i\boldsymbol{\alpha}).$$

Билинейные комбинации компонент указанного 4-тензора имеют вид

$$\mu_0 \bar{\Psi} J_{\mu\nu}^{(\gamma)} \Psi = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & M_3 & -M_2 & iP_1 \\ -M_3 & 0 & M_1 & iP_2 \\ M_2 & -M_1 & 0 & iP_3 \\ -iP_1 & -iP_2 & -iP_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.50)$$

где векторы $\mathbf{P}(x)$ и $\mathbf{M}(x)$, определяемые в стандартном представлении матриц γ_{μ} равенствами $\mathbf{P} = -i\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi$ и $\mathbf{M} = \mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi$, имеют смысл векторов электрической и магнитной поляризации.

С точки зрения исследования электромагнитного взаимодействия частиц с полуцелым спином нам достаточно введенных выше билинейных комбинаций (7.49) и (7.50), поскольку они позволяют определить 4-потенциал поля, создаваемый частицей, в произвольной точке пространства.

Отметим, что введенные билинейные комбинации являются действительными, поскольку

$$(j_{\mu}^{(e)})^* = j_{\mu}^{(e)}$$

и для эрмитовых матриц γ_{μ} выполняются следующие соотношения

$$(\bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi)^* = \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi, \quad (-i \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi)^* = -i \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi.$$

7.5.2. Операторы. В рамках теорий, линейных по оператору p_4 , основную роль играют квантово-механические средние, поэтому классификация операторов производится исходя из их свойств по отношению к значениям пространственных интегралов от билинейных комбинаций волновых функций с операторами. Как мы отмечали выше, в рамках теорий, квадратичных по оператору p_4 , самостоятельную роль играют сами билинейные комбинации волновых функций с операторами

рами, а не только пространственные интегралы от них. Тем не менее традиционная классификация операторов по-прежнему представляет определенный интерес.

В соответствии с общим определением, оператор L осуществляет линейное или антилинейное преобразование волновых функций:

$$\Psi'(x) = L\Psi(x).$$

При этом преобразованная волновая функция относится к тому же пространству, что и исходная, т. е. операторы осуществляют преобразование пространства волновых функций в себя. Линейность преобразования означает, что

$$L(a\Psi(x) + b\Phi(x)) = aL\Psi(x) + bL\Phi(x).$$

В свою очередь антилинейное преобразование имеет вид

$$L(a\Psi(x) + b\Phi(x)) = a^*L\Psi(x) + b^*L\Phi(x).$$

Оператор, сопряженный линейному оператору, определяется согласно следующему правилу:

$$\int \bar{\Psi}(x) \cdot L\Phi(x)dV = \int \bar{\Psi}(x)L^\dagger \cdot \Phi(x)dV, \quad (7.51)$$

где, так же как и выше, принято обозначение, согласно которому оператор действует на волновую функцию, стоящую по одну с ним сторону от точки. Несложно видеть, что оператор L , удовлетворяющий определению (7.51), не может быть антилинейным, поскольку в этом случае правая часть уравнения линейна по Φ , а левая антилинейна. Оператор, сопряженный антилинейному оператору, определяется согласно правилу

$$\int \bar{\Psi}(x) \cdot L\Phi(x)dV = \left(\int \bar{\Psi}(x)L^\dagger \cdot \Phi(x)dV \right)^*.$$

Комплексно сопрягая билинейную комбинацию волновых функций с оператором L , получаем

$$(\bar{\Psi} \cdot L\Psi)^* = \bar{\Psi}\gamma_4^{-1}L^+\gamma_4 \cdot \Psi = \bar{\Psi}L^\dagger \cdot \Psi, \quad (7.52)$$

где, как видно, сопряженный оператор L^\dagger определяется согласно правилу

$$L^\dagger = \gamma_4^{-1}L^+\gamma_4 \quad (7.53)$$

и L^+ — эрмитово-сопряженный оператор. Подставляя (7.52) в (7.51), получаем

$$\int \bar{\Psi}(x) \cdot L\Psi(x)dV = \int \bar{\Psi}(x)L^\dagger \cdot \Psi(x)dV = \left(\int \bar{\Psi}(x) \cdot L\Psi(x)dV \right)^*.$$

Таким образом, если сопряженный оператор определяется согласно правилу (7.53), то пространственные интегралы от билинейных комбинаций являются действительными.

Из определения (7.53) несложно видеть, что если оператор является функцией координат частицы или производных по ним, то сопряженный оператор совпадает с эрмитово-сопряженным оператором:

$$L^\dagger(x_\mu, \nabla_\mu) = \gamma_4^{-1} L^+(x_\mu, \nabla_\mu) \gamma_4 = L^+(x_\mu, \nabla_\mu).$$

Следовательно, пространственные интегралы от билинейных комбинаций с операторами, связанными только с трансляционными степенями свободы частицы, всегда являются действительными, поскольку соответствующие им сопряженные операторы являются эрмитовыми.

В случае операторов, связанных с внутренними степенями свободы частицы и, следовательно, зависящих от матриц γ_μ и их произведений, сопряженный оператор не всегда является эрмитово-сопряженным. Действительно, если в качестве базиса матриц γ_μ ($\mu = 1, 2, 3, 4$) выбрать эрмитовы матрицы $\gamma_\mu^+ = \gamma_\mu$ (например, как мы отмечали выше, матрицы γ_μ эрмитовы в стандартном представлении), то, как видно из определения (7.53), сопряженный оператор может быть как эрмитово-сопряженным, так и антиэрмитово-сопряженным оператором. Например:

$$\gamma_4^\dagger = \gamma_4^{-1} \gamma_4^+ \gamma_4 = \gamma_4 = \gamma_4^+.$$

С другой стороны,

$$\boldsymbol{\gamma}^\dagger = \gamma_4^{-1} \boldsymbol{\gamma}^+ \gamma_4 = -\boldsymbol{\gamma}^+.$$

В последнем случае эрмитово-сопряженным будет оператор $i\boldsymbol{\gamma}$.

Как мы отмечали выше, напряженности электрического и магнитного полей, создаваемых частицей, однозначно определяются решением уравнения (7.3), правая часть которого является билинейной комбинацией волновых функций. Условие действительности билинейных комбинаций волновых функций отличается от условия действительности пространственных интегралов от них. Учитывая (7.52), несложно видеть, что билинейная комбинация является действительной при выполнении условия

$$\bar{\Psi} L^\dagger \cdot \Psi = \bar{\Psi} \cdot L \Psi. \quad (7.54)$$

Однако и в случае когда

$$\bar{\Psi} L^\dagger \cdot \Psi = (\bar{\Psi} \cdot L \Psi)^*, \quad (7.55)$$

действительной является симметризованная билинейная комбинация

$$\frac{1}{2} (\bar{\Psi} \cdot L \Psi + \bar{\Psi} L^\dagger \cdot \Psi).$$

Частным случаем такой симметризованной билинейной комбинации является трансляционная часть 4-вектора плотности тока.

Обращаясь к определению сопряженного оператора (7.51), мы видим, что соотношение (7.54) соответствует линейному оператору, а (7.55) — антилинейному.

7.5.3. Сохраняющиеся величины. Несложно видеть, что если оператор L коммутирует с оператором уравнения (7.2), имеющим вид

$$\widehat{Z} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}),$$

то волновая функция $\Psi' = L\Psi$ также является решением уравнения (7.2). Отметим, для общности, что указанное справедливо и для операторов, антикоммутирующих с оператором Z . Поэтому если оператор L коммутирует с оператором уравнения (7.24), то волновая функция

$$\Psi'_n(\mathbf{r}, t) = L\Psi_n(\mathbf{r}, t)$$

также является решением задачи на собственные значения (7.24) и отвечает тому же собственному значению, что и Ψ_n . Ввиду ортогональности собственных функций, волновая функция $\Psi'_n(\mathbf{r}, t)$ может отличаться от волновой функции $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ лишь коэффициентом:

$$\Psi'_n(\mathbf{r}, t) = L\Psi_n(\mathbf{r}, t) = l_n \Psi_n(\mathbf{r}, t).$$

Таким образом, если оператор L коммутирует с оператором уравнения (7.24), то волновая функция Ψ_n является одновременно собственной функцией указанной краевой задачи, отвечающей собственному значению E_n , и собственной функцией оператора L , отвечающей собственному значению l_n .

Воспользуемся вновь уравнением (7.2) в форме (7.38):

$$\widehat{Z}\Psi = (\widehat{Z}_1 - \widehat{Z}_2)\Psi = 0, \quad (7.56)$$

где

$$\begin{aligned} \widehat{Z}_1 &= \widehat{K} + \widehat{Z}_{PM} = \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}), \\ \widehat{Z}_2 &= \widehat{T} = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi \right)^2. \end{aligned}$$

Следовательно, уравнение (7.2) можно переписать в следующем виде:

$$\widehat{Z}_2 \Psi = \widehat{Z}_1 \Psi.$$

Поддействуем на обе стороны указанного уравнения оператором L , тогда это уравнение примет вид

$$L\widehat{Z}_2 \Psi = L\widehat{Z}_1 \Psi. \quad (7.57)$$

Его можно переписать следующим образом:

$$\widehat{Z}_2 L\Psi = L\widehat{Z}_1 \Psi - [L, \widehat{Z}_2] \Psi.$$

Уравнение для сопряженной волновой функции $\overline{\Psi}$ имеет в общем случае вид

$$\overline{\Psi} \widehat{Z}_2^\dagger = \overline{\Psi} \widehat{Z}_1^\dagger, \quad (7.58)$$

где в соответствии с приведенным выше определением $\hat{Z}^\dagger = \gamma_4^{-1} \hat{Z} + \gamma_4$. Умножая уравнение (7.57) слева на $\bar{\Psi}$, а уравнение (7.58) справа на $L\Psi$ и вычитая затем из первого уравнения второе, получаем

$$\bar{\Psi} \cdot \hat{Z}_2 L\Psi - \bar{\Psi} \hat{Z}_2^\dagger \cdot L\Psi = \bar{\Psi} \cdot L \hat{Z}_1 \Psi - \bar{\Psi} \hat{Z}_1^\dagger \cdot L\Psi - \bar{\Psi} \cdot [L, \hat{Z}_2] \Psi.$$

Введем для краткости записи вспомогательный оператор $\hat{\theta}$:

$$\hat{\theta} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi.$$

Тогда левую часть последнего соотношения можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \bar{\Psi} \cdot \hat{\theta} \hat{\theta} L\Psi - \hat{\theta}^+ \hat{\theta}^+ \bar{\Psi} \cdot L\Psi &= \\ &= i\hbar \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \hat{\theta} L\Psi}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\theta}^+ \bar{\Psi}}{\partial t} L\Psi \right) - U \left(\bar{\Psi} \cdot \hat{\theta} L\Psi - \hat{\theta}^+ \bar{\Psi} \cdot L\Psi \right) = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{\theta}^+ \bar{\Psi} \cdot L\Psi + \bar{\Psi} \cdot \hat{\theta} L\Psi \right). \end{aligned}$$

В свою очередь правую часть указанного соотношения можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi} \cdot L \hat{Z}_1 \Psi - \bar{\Psi} \hat{Z}_1^\dagger \cdot L\Psi - \bar{\Psi} \cdot [L, \hat{Z}_2] \Psi &= \\ &= \bar{\Psi} \cdot [L, \hat{Z}] \Psi + \frac{i\hbar}{2m_0} \operatorname{div} \left[\bar{\Psi} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) L\Psi - \left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot L\Psi \right]. \end{aligned}$$

Интегрируя затем обе части уравнения по бесконечному пространственному объему и полагая, что интеграл от дивергенции равен нулю, окончательно получаем

$$\frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \frac{d}{dt} \int \left(\bar{\Psi} \hat{\theta}^+ \cdot L\Psi + \bar{\Psi} \cdot \hat{\theta} L\Psi \right) dV = \int \bar{\Psi} \cdot [L, \hat{Z}] \Psi dV. \quad (7.59)$$

Действуя теперь справа на обе стороны уравнения (7.58) оператором L^\dagger и проводя преобразования, аналогичные вышеприведенным, получаем

$$\frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \frac{d}{dt} \int \left(\bar{\Psi} L^\dagger \hat{\theta}^+ \cdot \Psi + \bar{\Psi} L^\dagger \cdot \hat{\theta} \Psi \right) dV = \int \bar{\Psi} [L^\dagger, \hat{Z}^\dagger] \cdot \Psi dV. \quad (7.60)$$

Из (7.59) и (7.60) следует, что если оператор L коммутирует с оператором \hat{Z} уравнения (7.2)

$$L \hat{Z} - \hat{Z} L = 0,$$

то для линейного оператора сохраняющейся является следующая величина:

$$\frac{1}{4m_0 c^2} \int \left(\bar{\Psi} \hat{\theta}^+ \cdot L\Psi + \bar{\Psi} \cdot \hat{\theta} L\Psi + \bar{\Psi} L^\dagger \hat{\theta}^+ \cdot \Psi + \bar{\Psi} L^\dagger \cdot \hat{\theta} \Psi \right) dV = \text{const}. \quad (7.61)$$

В частном случае, когда оператор L является тождественным оператором, $L = q_0 I$, сохраняющейся величиной является электрический заряд. В случае когда оператор $L = \hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$, последнее выражение совпадает с выражением (7.41) для энергии частицы в стационарном внешнем электромагнитном поле. Отметим, что если электромагнитное поле не является стационарным, то оператор \hat{E} не коммутирует с оператором \hat{Z} .

Пусть волновая функция является суперпозицией собственных функций уравнения (7.24):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n \Psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right).$$

Учитывая условие ортонормированности волновых функций (7.26), для сохраняющейся величины (7.61) получаем

$$\frac{1}{4m_0 c^2} \int \left(\bar{\Psi} \hat{\theta}^+ \cdot L \Psi + \bar{\Psi} \cdot \hat{\theta} L \Psi + \bar{\Psi} L^\dagger \hat{\theta}^+ \cdot \Psi + \bar{\Psi} L^\dagger \cdot \hat{\theta} \Psi \right) dV = \sum_n l_n |a_n|^2. \quad (7.62)$$

Таким образом, сохраняющейся величиной является квантово-механическое среднее оператора L .

7.6. Классификация состояний свободной частицы

Пространство состояний свободной скалярной частицы состоит из двух гиперповерхностей:

$$E_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}.$$

Такой же вид имеет гиперповерхность состояний свободной спинорной частицы. Однако ввиду наличия внутренних степеней свободы спинорной частицы, одного векторного числа \mathbf{p} недостаточно для определения состояния поля. Состояние частицы по внутренним степеням свободы задается вектором $\boldsymbol{\lambda}$, к обсуждению размерности и физического смысла компонент которого мы перейдем в настоящей главе.

Очевидно, что каждому набору квантовых чисел $n = (\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda})$, определяющих состояние спинорного материального поля, отвечает лишь одно временное решение уравнений, линейных по оператору p_4 , в качестве которого из соображений, изложенных во введении к гл. 4, выбирается положительно частотное решение. Появляющиеся в теории вторичного квантования отрицательно частотные решения являются решениями уравнения для сопряженной волновой функции ψ^* и связываются с понятием античастицы. Таким образом, в рамках аппарата вторичного квантования естественно предполагается, что волновые поля, описываемые волновыми функциями ψ и ψ^* , являются компонентами единого материального поля. Возникающие принципиальные различия между теориями, основанными на уравнениях, ли-

нейных и квадратичных по оператору p_4 , можно пояснить следующим образом. Во-первых, спектры собственных значений уравнений для волновых функций ψ и ψ^* зеркально симметричны относительно плоскости $E = 0$, поэтому $\psi^{*(+)} = \psi^{(-)}$. Во-вторых, при анализе задач взаимодействия скалярной частицы с электромагнитными полями мы обошлись без привлечения термина античастица, используя лишь понятие зарядово-сопряженной частицы. Однако несмотря на то что в случае скалярных полей уравнение для зарядово-сопряженной частицы совпадает с уравнением для комплексно сопряженной функции уравнения для частицы: $\psi_C = \psi^*$, уравнения для волновых функций ψ и ψ_C мы можем рассматривать как уравнения различных материальных полей. Взаимодействие частиц, описываемых указанными полями, должно рассматриваться в рамках двухчастичной теории. В-третьих, отрицательно частотные решения уравнения для частицы однозначно связаны с положительно частотными решениями уравнения для зарядово-сопряженной частицы. Вместе с тем в пространственно неоднородном внешнем поле собственные значения этих двух краевых задач кардинально различаются, поскольку, например, одна задача отвечает движению частицы в притягивающем кулоновском поле, а другая — в отталкивающем. Положительно частотные решения отвечают состояниям частицы, а отрицательно частотные — состояниям зеркальной частицы. Однако поскольку решения для частицы и зеркальной частицы являются решениями одного и того же уравнения, то взаимодействие этих двух объектов описывается в рамках одночастичной теории.

Перечисленные выше отличия между понятиями частица, зеркальная частица и зарядово-сопряженная частица были получены нами на основе анализа задач взаимодействия скалярного материального и электромагнитного полей, поскольку решения задачи о движении свободной частицы указанных различий не выявляют. Размерность пространства состояний спинорного материального поля увеличивается по сравнению с размерностью пространства состояний скалярного поля, поэтому попытка ввести классификацию состояний спинорного материального поля на основе анализа решений для свободной частицы выглядит еще более неоправданной. Тем не менее структура уравнения (7.2) свидетельствует о том, что свойства свободных спинорных материальных полей, обусловленные трансляционными степенями свободы движения частицы, должны быть близки к свойствам свободных скалярных полей. Возникающие отличия могут быть связаны лишь с наличием внутренних степеней свободы. Поэтому, учитывая результаты, полученные в предыдущих главах, можно начать анализ классификации состояний спинорного поля на основе решений задачи о движении свободной спинорной частицы. Более детальную информацию об отличительных свойствах частиц, находящихся в различных состояниях спинорного материального поля, мы получим позже из анализа задач взаимодействия.

7.6.1. Симметрия решений уравнения для свободной частицы по отношению к зарядовому сопряжению. Условия нормировки волновой функции уравнения (7.2), полученные в предыдущих разделах, внешне совпадают с условиями нормировки скалярной волновой функции уравнения КГФ. Однако несмотря на внешнее сходство, существуют и принципиальные различия. Действительно, рассмотрим положительно и отрицательно частотные решения уравнения (7.2) следующего вида:

$$\begin{aligned}\Psi_n^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}) \\ d_n(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right), \\ \Psi_n^{(2)}(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}) \\ d_n(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \exp\left(i\frac{E_n}{\hbar}t\right).\end{aligned}\quad (7.63)$$

Заряд частицы в состояниях с волновыми функциями (7.63) определяется выражениями

$$q^{(1)} = \frac{q_0}{m_0c^2} \int (u_n^+ u_n - d_n^+ d_n) (E_n - q_0 \varphi_0(\mathbf{r})) dV, \quad (7.64)$$

$$q^{(2)} = -\frac{q_0}{m_0c^2} \int (u_n^+ u_n - d_n^+ d_n) (E_n + q_0 \varphi_0(\mathbf{r})) dV. \quad (7.65)$$

Несложно видеть, что, во всяком случае при $E_n \approx m_0c^2$, знак заряда частицы в отрицательно частотном состоянии $\Psi_n^{(2)}$, так же как и в случае скалярной частицы, противоположен знаку заряда в положительно частотном состоянии $\Psi_n^{(1)}$. Как видно, при операции зарядового сопряжения ($q_0 \rightarrow -q_0$) выражение (7.65) совпадает с выражением (7.64). С другой стороны, заряд частицы, находящейся в положительно частотном состоянии с волновой функцией

$$\Psi_n^{(3)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} d_n(\mathbf{r}) \\ u_n(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right),$$

также противоположен заряду частицы в состоянии $\Psi_n^{(1)}$:

$$q^{(3)} = -\frac{q_0}{m_0c^2} \int (u_n^+ u_n - d_n^+ d_n) (E_n - q_0 \varphi_0(\mathbf{r})) dV. \quad (7.66)$$

Однако плотность заряда частицы, находящейся в состоянии с волновой функцией $\Psi_n^{(3)}$, отличается от плотности заряда частицы, находящейся в состоянии с волновой функцией $\Psi_n^{(2)}$, и противоположна по знаку плотности заряда частицы, находящейся в состоянии с волновой функцией $\Psi_n^{(1)}$. Далее, несложно видеть, что при преобразовании $q_0 \rightarrow -q_0$ заряд частицы, находящейся в состоянии с волновой функцией $\Psi_n^{(3)}$, становится противоположен заряду частицы, находящейся в отрицательно частотном состоянии $\Psi_n^{(2)}$.

Анализ, проведенный в предыдущих главах, с неоспоримостью показал, что отрицательно частотные решения уравнения для частицы связаны с состояниями зеркальных частиц. Поэтому, учитывая совпадение трансляционных частей уравнений (7.2) и (4.3), мы также свяжем отрицательно частотные решения уравнения (7.2) с состояниями зеркальных частиц. Основания для такой связи будут приведены в последующих главах, где будут рассмотрены задачи о движении частицы в пространственно неоднородных электрических и магнитных полях.

В свою очередь, учитывая соотношение между формулами (7.64) и (7.66), состояние, описываемое волновой функцией $\Psi_n^{(3)}$, можно связать с состоянием античастицы. Следует, однако, отметить, что биспиноры $\Psi_n^{(1)}$ и $\Psi_n^{(3)}$ не образуют полного базиса ортогональных биспиноров, поэтому понятий «частица» и «античастица» недостаточно для определения всех состояний спинорного поля. Полный базис ортогональных биспиноров будет определен в следующей главе, там же будет введено понятие квартионов как элементарных составляющих спинорного поля. Удобство использования термина античастица состоит в том, что биспиноры, связанные соотношением $\Psi_n^{(3)} = -\gamma_5 \Psi_n^{(1)}$, характеризуются противоположной величиной плотности заряда во всех точках пространства. В настоящей главе мы покажем, что противоположна не только плотность заряда, но и другие характеристики, определяющие состояние спинорного поля.

Покажем, что в случае свободной частицы отрицательно частотное решение уравнения для частицы связано с положительно частотным решением уравнения для зарядово-сопряженной частицы теми же соотношениями, что и в случае скалярных полей.

Запишем уравнение (7.2) для свободной частицы в следующем виде:

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (7.67)$$

где \mathbf{A}_0 — постоянный вектор, а $U_0 = q_0 \varphi_0$ — константа. Поскольку согласно принципу градиентной инвариантности изменение 4-потенциала электромагнитного поля на постоянную величину не меняет значений наблюдаемых величин, то уравнение (7.67) является уравнением свободной частицы, а постоянный 4-потенциал поля $A_\mu^{(0)}$ введен в уравнение лишь для удобства последующего изложения.

Общее решение уравнения (7.67) можно представить в следующем виде:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \left[A_n^{(+)} \xi_n^{(+)} \exp \left(-i \frac{E_n^{(+)} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} \right) + A_n^{(-)} \xi_n^{(-)} \exp \left(-i \frac{E_n^{(-)} t + \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} \right) \right], \quad (7.68)$$

где $n = (\mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda})$, $A_n^{(\pm)}$ — произвольные константы, $\xi_n^{(\pm)}$ — биспинорные волновые функции, определяющие состояние частицы по внутренним степеням свободы ее движения, а $E_n^{(\pm)}$ определяются выражениями

$$E_n^{(\pm)} = E^{(\pm)}(\mathbf{p}) = U_0 \pm \sqrt{\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0\right)^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (7.69)$$

Таким образом, два слагаемых в квадратных скобках выражения (7.68) представляют собой два линейно независимых решения уравнения (7.67), относящиеся к двум зонам состояний $E^{(\pm)}(\mathbf{p})$, отделенным друг от друга энергетическим зазором

$$\Delta E = E^{(+)}(\mathbf{p}_0) - E^{(-)}(\mathbf{p}_0) = 2m_0 c^2,$$

где $\mathbf{p}_0 = q_0 \mathbf{A}_0 / c$.

Уравнение для зарядово-сопряженной свободной частицы имеет вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + U_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi_C(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (7.70)$$

Решение этого уравнения можно записать в виде аналогичном (7.68):

$$\Psi_C(\mathbf{r}, t) = \sum_n \left[B_n^{(+)} \eta_n^{(+)} \exp\left(-i \frac{E_{Cn}^{(+)} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) + B_n^{(-)} \eta_n^{(-)} \exp\left(-i \frac{E_{Cn}^{(-)} t + \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right) \right], \quad (7.71)$$

где

$$E_{Cn}^{(\pm)} = E_C^{(\pm)}(\mathbf{p}) = -U_0 \pm \sqrt{\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0\right)^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (7.72)$$

Две зоны состояний свободной зарядово-сопряженной частицы также разделены энергетическим интервалом $\Delta E_C = 2m_0 c^2$. Однако запрещенные зоны состояний для частицы и зарядово-сопряженной частицы не совпадают. Они могут перекрываться, если $U_0 < m_0 c^2$, или не перекрываться, когда $U_0 > m_0 c^2$.

Используя симметричные свойства уравнений (7.67) и (7.70), можно связать отрицательно частотные решения уравнения для частицы,

$$\Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}}^{(-)} \xi_{\mathbf{p}}^{(-)} \exp\left(-i \frac{E^{(-)} t + \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right),$$

с положительно частотными решениями уравнения для зарядово-сопряженной частицы,

$$\Psi_C^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} B_{\mathbf{p}}^{(+)} \eta_{\mathbf{p}}^{(+)} \exp\left(-i \frac{E_C^{(+)} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right).$$

Действительно, уравнение, комплексно сопряженное с уравнением (7.70),

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi_C^* (\mathbf{r}, t) = 0,$$

совпадает с уравнением (7.67). В результате получаем

$$\Psi_C^{(+)*} (\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} \left(B_{-\mathbf{p}}^{(+)} \eta_{-\mathbf{p}}^{(+)} \right)^* \exp \left(-i \frac{E^{(-)} t + \mathbf{p} \mathbf{r}}{\hbar} \right) = \Psi^{(-)} (\mathbf{r}, t).$$

Поскольку собственные значения (7.69) и (7.72) вырождены относительно квантовых чисел λ , то в целях краткости мы оставили в последних формулах лишь суммирование по компонентам импульса \mathbf{p} .

Таким образом, в случае свободных спинорных частиц отрицательные частотные решения уравнения для частицы связаны с положительно частотными решениями уравнения для зарядово-сопряженной частицы теми же соотношениями, что и в случае скалярных частиц. Связь уравнений для частицы и зарядово-сопряженной частицы, взаимодействующих с электромагнитными полями, будет определена в разделе 7.7.

7.6.2. Квантовые числа, определяющие состояние частицы по внутренним степеням свободы. Учитывая наличие указанной выше связи между положительно и отрицательно частотными решениями, обратимся к анализу положительно частотных решений. Положительно частотные решения уравнения (7.67) можно записать в следующем виде:

$$\Psi (\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}} \exp \left(-i \frac{Et - \mathbf{p} \mathbf{r}}{\hbar} \right). \quad (7.73)$$

Волновая функция (7.73) сходна с волновой функцией скалярной релятивистской частицы. Однако состояния свободной частицы, описываемой положительно частотной скалярной волновой функцией, характеризуются лишь одним векторным квантовым числом \mathbf{p} — собственным значением оператора импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$. Для характеристики состояний свободной частицы, описываемой положительно частотной спинорной волновой функцией, наряду с собственным значением оператора импульса, определяющим состояние трансляционных степеней свободы частицы, необходимо ввести дополнительные квантовые числа, определяющие ее состояние по внутренним степеням свободы, т. е. задающие вид биспиноров $\psi_{\mathbf{p}}$.

Как видно из структуры уравнения (7.2), при анализе задач о движении частицы во внешнем электромагнитном поле в качестве указанных биспиноров удобно выбрать собственные функции оператора $\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} F_{\nu\mu}$, которые связаны с выделенными в пространстве направлениями, определяющимися направлением векторов напряженности электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{B} полей электромагнитной волны. Это будет сделано в гл. 8.

В задаче о движении свободной частицы выделенных в пространстве направлений нет, поэтому можно поступить следующим образом. Поскольку оператор спина коммутирует с оператором уравнения (7.2) для свободной частицы, то в качестве ортогональных биспиноров можно взять собственные функции уравнения

$$(\mathbf{n}\Sigma)\psi_n = h_n\psi_n, \quad (7.74)$$

где \mathbf{n} — произвольный единичный вектор. Существует четыре линейно независимых биспинорных решения уравнения (7.74), которые можно выбрать в следующем виде:

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (7.75)$$

где трехмерные спиноры w_σ являются собственными функциями уравнения

$$(\mathbf{n}\sigma)w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}. \quad (7.76)$$

Биспиноры ψ_n нормированы следующими условиями:

$$\bar{\psi}_n\psi_m = I_n\delta_{nm},$$

где

$$I_n = \begin{cases} 1, & \{n, m\} = 1, 2, \\ -1, & \{n, m\} = 3, 4. \end{cases}$$

Здесь фигурные скобки означают, что любой из двух индексов может принимать указанные значения. В качестве единичного вектора \mathbf{n} в уравнении (7.74) можно выбрать вектор

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{p},$$

тогда собственное значение h_n будет определять спиральность, т. е. значение проекции спина на направление движения частицы. Рассмотрим одно из слагаемых суммы (7.73) по плоским волнам. Пусть направление распространения волны совпадает с осью z , тогда спиноры $w^{(\sigma)}$ имеют вид

$$w^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.77)$$

Собственные значения спиральности, определяемые уравнением (7.74), двукратно вырождены:

$$h_1 = h_3 = +1, \quad h_2 = h_4 = -1.$$

С другой стороны, используя (7.75), получаем

$$\bar{\psi}_1\Sigma_z\psi_1 = 1, \quad \bar{\psi}_3\Sigma_z\psi_3 = -1, \quad (7.78)$$

т. е. одному и тому же собственному значению спиральности отвечают два состояния, отличающиеся по значению проекции спина на направление движения частицы. Это и неудивительно, поскольку спираль-

ность может определять однозначно лишь состояние трехмерных спинов, а не биспинов. Итак, одного квантового числа h_n недостаточно для задания состояния частицы по внутренним степеням свободы ее движения.

Важную роль в теории частиц с полуцелым спином играет оператор $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$. Как мы отмечали ранее, этот оператор антикоммутирует со всеми матрицами γ_μ ($\mu = 1, 2, 3, 4$):

$$\gamma_5\gamma_\mu + \gamma_\mu\gamma_5 = 0,$$

и в стандартном представлении имеет вид

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = -\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.79)$$

Оператор γ_5 коммутирует с оператором уравнения (7.2) в общем случае, т. е. для частицы, взаимодействующей с произвольным внешним электромагнитным полем. Собственные волновые функции оператора γ_5 являются решениями следующего уравнения на собственные значения:

$$\gamma_5\psi_\lambda = \lambda_5\psi_\lambda.$$

Поскольку $\gamma_5^2 = I$, то $\lambda_5 = \pm 1$, поэтому, используя (7.79), получаем

$$\psi_{+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w \\ -w \end{pmatrix}, \quad \psi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w \\ w \end{pmatrix}, \quad (7.80)$$

где w — произвольный единичный спинор. Оператор γ_5 является антиэрмитово-сопряженным оператором:

$$\gamma_5^\dagger = \gamma_4^{-1}\gamma_5^+\gamma_4 = -\gamma_5^+,$$

поэтому его собственные решения удовлетворяют следующим соотношениям ортогональности¹⁾:

$$\bar{\psi}_\lambda\psi_\lambda = 0, \quad \bar{\psi}_{+1}\psi_{-1} = \bar{\psi}_{-1}\psi_{+1} = 1.$$

Поскольку оператор γ_5 коммутирует с гамильтонианом уравнения (7.2), то собственные волновые функции уравнения (7.2), отвечающие определенному значению энергии частицы, являются также и собственными волновыми функциями, отвечающими определенному значению квантового числа $\lambda_5 = \pm 1$. Например, линейные комбинации собственных функций оператора спина (7.75), отвечающие вырожденным значениям спиральности, являются собственными функциями

¹⁾ Далее мы покажем, что эрмитово-сопряженным оператором является оператор $\Gamma_5 = -i\gamma_5$, собственные значения которого $\lambda_{1,2} = \pm i$ являются комплексными, поэтому его собственные волновые функции $\psi_1 = \psi_{-1}$ и $\psi_2 = \psi_{+1}$ удовлетворяют тем же соотношениям ортогональности.

оператора γ_5 и отвечают различным его собственным значениям. Действительно,

$$\begin{aligned}\psi^{(1,2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \pm \psi_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ \pm w^{(+)} \end{pmatrix}, \\ \psi^{(3,4)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_2 \pm \psi_4) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ \pm w^{(-)} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (7.81)$$

Таким образом, оператор γ_5 снимает вырождение по спиральности, поэтому комбинация двух бинарных квантовых чисел, $\boldsymbol{\lambda} = (h, \lambda_5)$, где $h = \pm 1$, $\lambda_5 = \pm 1$, однозначно определяет состояние четырех ортогональных биспиноров $\psi^{(\lambda)}$, определяемых формулами (7.81).

Забегая вперед, отметим, что между матрицами $\boldsymbol{\alpha}$ и $\boldsymbol{\Sigma}$ имеет место соотношение $\boldsymbol{\alpha} = -\gamma_5 \boldsymbol{\Sigma}$, поэтому, учитывая структуру уравнения (7.2), несложно видеть, что задание двух бинарных квантовых чисел ($\sigma = \pm 1, \lambda_5 = \pm 1$) однозначно определяет величины проекций векторов магнитной и электрической поляризации на направление векторов напряженности магнитного \mathbf{B} и электрического \mathbf{E} полей внешней волны.

7.6.3. Билинейные комбинации, определяющие состояние материального поля. Итак, каждое из положительно частотных решений (7.73), отвечающее определенному значению импульса частицы \mathbf{p} , имеет вид

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda=1}^4 C_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} \psi^{(\lambda)} \exp[-i(E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar]. \quad (7.82)$$

При заданном \mathbf{p} волновая функция зависит от четырех комплексных коэффициентов $C_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}$. Следовательно, в отличие от случая скалярной частицы, когда условие нормировки позволяет определить величину константы $C_{\mathbf{p}}$ и, тем самым, полностью задать волновую функцию состояния частицы с определенным значением импульса, для однозначного задания состояния частицы с полуцелым спином необходимо задать восемь билинейных действительных комбинаций волновых функций.

Как мы видели в разделе 2.3.2, состояние нерелятивистской частицы со спином задается четырьмя билинейными действительными комбинациями волновых функций: нормой волновой функции $N = \psi^+(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)$ и тремя проекциями магнитного момента частицы $\mathbf{M} = \mu_0 \psi^+(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\sigma} \psi(\mathbf{r}, t)$. В случае релятивистской спинорной частицы, наряду с нормой волновой функции, появляются две векторные билинейные комбинации волновых функций, отвечающие наблюдаемым величинам и имеющие смысл векторов магнитной и электрической поляризации. В результате мы получаем семь действительных скалярных величин. Необходимая восьмая билинейная комбинация определяется

из соображений релятивистской инвариантности. Сделаем следующие преобразования:

$$N = \bar{\Psi}\Psi = \Psi^+\gamma_4\Psi, \quad (7.83)$$

$$\mathbf{P} = -i\bar{\Psi}\boldsymbol{\alpha}\Psi = \bar{\Psi}\gamma_4\boldsymbol{\gamma}\Psi = \Psi^+\boldsymbol{\gamma}\Psi, \quad (7.84)$$

$$\mathbf{M} = \bar{\Psi}\boldsymbol{\Sigma}\Psi = i\Psi^+\gamma_5\boldsymbol{\gamma}\Psi. \quad (7.85)$$

Сравнивая полученные выражения, несложно видеть, что в качестве восьмой билинейной комбинации волновых функций выступает псевдоскалярная величина

$$\Gamma = i\Psi^+\gamma_5\gamma_4\Psi = -i\bar{\Psi}\gamma_5\Psi. \quad (7.86)$$

Как мы отмечали выше, ортогональные биспиноры (7.81) имеют нулевую норму, поэтому состояния частиц, характеризуемые конечным зарядом и массой, будут являться суперпозицией ортогональных биспиноров (7.81). В качестве таких суперпозиционных состояний мы можем взять ортогональные биспиноры (7.75). Действительно, биспиноры (7.75) и (7.81) являются линейными комбинациями друг друга, поэтому, вводя новые константы A_n , удовлетворяющие соотношению

$$\sum_{\lambda=1}^4 C^{(\lambda)}\psi^{(\lambda)} = \sum_{n=1}^4 A_n\psi_n,$$

мы можем представить волновую функцию (7.82) в виде разложения по ортогональным биспинорам (7.75). Учитывая явный вид спиноров (7.77), получаем

$$N = \bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\Psi_{\mathbf{P}} = |A_1|^2 + |A_2|^2 - |A_3|^2 - |A_4|^2, \quad (7.87)$$

$$M_z = \bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\Sigma_z\Psi_{\mathbf{P}} = |A_1|^2 - |A_2|^2 - |A_3|^2 + |A_4|^2, \quad (7.88)$$

$$M_x = \bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\Sigma_x\Psi_{\mathbf{P}} = A_1^*A_2 + A_1A_2^* - A_3^*A_4 - A_3A_4^*, \quad (7.89)$$

$$M_y = \bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\Sigma_y\Psi_{\mathbf{P}} = i(A_1A_2^* - A_1^*A_2 - A_3A_4^* + A_3^*A_4), \quad (7.90)$$

$$P_z = -i\bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\alpha_z\Psi_{\mathbf{P}} = i(A_1A_3^* - A_1^*A_3 - A_2A_4^* + A_2^*A_4), \quad (7.91)$$

$$P_x = -i\bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\alpha_x\Psi_{\mathbf{P}} = i(A_1A_4^* - A_1^*A_4 + A_2A_3^* - A_2^*A_3), \quad (7.92)$$

$$P_y = -i\bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\alpha_y\Psi_{\mathbf{P}} = -A_1^*A_4 - A_1A_4^* + A_2A_3^* + A_2^*A_3, \quad (7.93)$$

$$\Gamma = -i\bar{\Psi}_{\mathbf{P}}\gamma_5\Psi_{\mathbf{P}} = i(A_1A_3^* - A_1^*A_3 + A_2A_4^* - A_2^*A_4). \quad (7.94)$$

Поскольку для свободной частицы

$$E = \frac{E_{\mathbf{P}}^2}{m_0c^2} \int \bar{\Psi}_{\mathbf{P}}(\mathbf{r})\Psi_{\mathbf{P}}(\mathbf{r})dV, \quad q = \frac{q_0E_{\mathbf{P}}}{m_0c^2} \int \bar{\Psi}_{\mathbf{P}}(\mathbf{r})\Psi_{\mathbf{P}}(\mathbf{r})dV,$$

то из (7.87) следует, что решениям $\psi_{1,2}$ соответствует положительные значения энергии и заряда частицы, а решениям $\psi_{3,4}$ — отрицательные, поэтому состояния с равным нулю нижним спинором биспинорной волновой функции мы можем связать с состояниями частицы, а состоя-

ния с равным нулю верхним спинором — с состояниями античастицы. Таким образом, состояния частицы и античастицы отвечают двум собственным волновым функциям оператора γ_4 . Действительно, уравнение на собственные значения

$$\gamma_4 \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda$$

имеет следующие решения:

$$\psi_{+1} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ I \end{pmatrix}.$$

Собственные функции оператора γ_4 отвечают чистым состояниям частицы и античастицы. Суперпозиционные состояния вида

$$\Psi = A\psi_{+1} + B\psi_{-1}$$

можно связать с состояниями частицы при положительном значении нормы волновой функции $N = \bar{\Psi}\Psi = |A|^2 - |B|^2 > 0$ и с состояниями античастицы при отрицательном значении нормы.

Как видно, в качестве пары бинарных квантовых чисел, определяющих состояние спинорного материального поля по внутренним степеням свободы, наряду с парой $\lambda = (h, \lambda_5)$, мы можем взять также и пару $\lambda = (h, \lambda_4)$.

Обращаясь вновь к выражениям (7.87)–(7.94), отметим, что компоненты вектора \mathbf{M} отличны от нуля как для суперпозиции чистых состояний частицы $\psi_1 \pm \psi_2$, так и для суперпозиции чистых состояний античастицы $\psi_3 \pm \psi_4$. Компоненты вектора \mathbf{P} отличны от нуля только в том случае, когда и верхний и нижний спиноры суперпозиционной волновой функции одновременно отличны от нуля, например $\psi_{1,2} \pm \psi_{3,4}$. Из приведенных выражений следует также, что $N + M_z$ и $V + P_z$ отличны от нуля только в том случае, когда суперпозиционное состояние включает частицы с $h_\lambda = 1$, в то время как $N - M_z$ и $V - P_z$ отличны от нуля, если суперпозиционное состояние включают частицы с $h_\lambda = -1$.

В случае скалярной частицы пространство состояний разбивается на две зоны, одна из которых содержит положительно частотные решения, а другая — отрицательно частотные. Зона положительно частотных решений отвечает состояниям частицы, а зона отрицательно частотных решений — состояниям зеркальной частицы. В случае свободного скалярного поля эти две зоны состояний отвечают частицам противоположного знака заряда. Размерность пространства состояний спинорного материального поля увеличивается. Из вышеприведенного обсуждения следует, что и зона положительно частотных решений, и зона отрицательно частотных решений включают состояния, отвечающие частицам противоположного заряда. Учитывая, что оператор γ_5 коммутирует с оператором уравнения (7.2), а его собственные волновые функции имеют вид (7.80), несложно догадаться, что каждая из зон содержит две пары состояний, отвечающих частицам противоположного заряда. В случае свободной частицы волновые функции, отвечающие этим двум парам состояний, получаются из общей волновой

функции, если подействовать на нее операторами $(I \pm \gamma_4) / 2$. Каждая из пар содержит решения, отвечающие двум значениям спиральности. Следуя аналогии со свойствами скалярной частицы, можно положить, что зона положительно частотных решений состоит из четырех подзон, две из них отвечают состояниям частицы, характеризующимся противоположным значениям спиральности, а две оставшиеся — состояниям античастицы, также характеризующимся двумя противоположными значениями спиральности. Учитывая вид уравнения (7.2), несложно видеть, что спиральность является удобным квантовым числом только в случае свободной частицы. В случае частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем, более естественным является задание величины проекции спина на направление магнитного поля, поскольку эта компонента спина частицы коммутирует с оператором уравнения (7.2) в случае движения частицы в однородном магнитном поле. Общий вид четырех ортогональных биспиноров, входящих в выражение (7.82), будет определен в следующей главе.

Уже в случае скалярных материальных полей мы видели, что знак заряда не определяет однозначно состояния материального поля, поскольку противоположный знак заряда, по отношению к знаку заряда частицы, могут иметь зарядово-сопряженная частица и зеркальная частица. В случае спинорных материальных полей противоположный знак заряда могут иметь зарядово-сопряженная частица, зеркальная частица и античастица. Таким образом, уже из общих соображений следует, что должны существовать дополнительные характеристики состояния материального поля, для того чтобы различить указанные его состояния.

7.6.4. Спин и спиральность. В рамках теорий, линейных по оператору p_4 , спиральность, т. е. проекция спина на направление движения частицы, полностью определяет состояние частицы. Это связано с тем, что в рамках нерелятивистских теорий спин определяется выражением $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} / 2$, следовательно, состояние частицы определяется собственными функциями спинора. В рамках же релятивистских теорий, линейных по оператору p_4 , состояния верхнего и нижнего спиноров биспинорной волновой функции являются взаимозависимыми, даже и в случае свободной частицы. Напротив, как следует из вида уравнения (7.2), верхний и нижний спиноры биспинорной волновой функции свободной частицы являются полностью независимыми, поэтому спиральность не определяет состояния материального спинорного поля.

Состояние спинорного материального поля определяется как трансляционными степенями свободы, например собственными значениями оператора импульса \mathbf{p} , так и внутренними степенями свободы, характеризующимися векторами магнитной \mathbf{M} и электрической \mathbf{P} поляризации. Как видно из структуры уравнения (7.2), векторы \mathbf{M} и \mathbf{P} ориентируются вдоль направления векторов напряженности магнитного и электрического полей в данной точке пространства соответственно,

поэтому состояние частицы по внутренним степеням свободы удобно связать с направлением указанных векторов напряженности. Однако направление векторов напряженности магнитного и электрического полей может быть различным в различных точках пространства. Вместе с тем трансляционное движение частицы удобно рассматривать в неподвижной системе координат, связанной, например, с направлением импульса падающей частицы.

Таким образом, мы видим, что часто бывает удобно использовать две различные системы координат для задания состояния векторов, определяющих трансляционное движение частицы и ее эволюцию по внутренним степеням свободы. Рассмотрим, например, задачу о рассеянии частицы пространственно неоднородным магнитным полем $\mathbf{V}(\mathbf{r})$. В случае когда направление вектора \mathbf{V} остается неизменным, а от координат зависит лишь величина напряженности поля, удобно выбрать систему координат, определяющую состояние по внутренним степеням свободы, т. е. с осью z , направленной вдоль вектора \mathbf{V} . Однако импульс падающей частицы \mathbf{p}_0 может быть произвольно ориентирован относительно направления вектора \mathbf{V} , поэтому ось z' , выбранная вдоль направления вектора \mathbf{p}_0 , будет отличаться от оси z .

Учитывая вышесказанное, приведем решение уравнения (7.76), определяющее собственные спиноры $w_{\mathbf{p}}^{(\sigma)}$, для случая когда частица движется в произвольном направлении \mathbf{p} , задаваемом углами θ и φ в системе координат, связанной с внутренними степенями свободы движения частицы. К этим формулам мы будем часто обращаться в дальнейшем изложении. Они имеют вид

$$\begin{aligned} w_{\mathbf{p}}^{(\sigma=+1)} &= \begin{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right) \cos\frac{\theta}{2} \\ \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right) \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ w_{\mathbf{p}}^{(\sigma=-1)} &= \begin{pmatrix} -\exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right) \sin\frac{\theta}{2} \\ \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right) \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.95)$$

Направление вектора $-\mathbf{p}$ определяется углами $\theta' = \pi - \theta$ и $\varphi' = \varphi + \pi$, поэтому

$$w_{-\mathbf{p}}^{(\sigma=+1)} = iw_{\mathbf{p}}^{(\sigma=-1)}, \quad w_{-\mathbf{p}}^{(\sigma=-1)} = iw_{\mathbf{p}}^{(\sigma=+1)}.$$

При $\theta = 0$ и $\varphi = 0$ спиноры (7.95) совпадают со спинорами (7.77).

В следующей главе мы покажем, что спиноры (7.95) являются собственными функциями уравнения $\sigma_r w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}$, где $\sigma_r = (\mathbf{e}_r, \boldsymbol{\sigma})$ и $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/r$.

7.7. Пространственная инверсия, обращение времени и зарядовое сопряжение

Перейдем теперь к обсуждению симметричных свойств уравнения (7.2) относительно преобразований пространственной инверсии, обращения времени и зарядового сопряжения. В случае свободной частицы уравнение (7.2) инвариантно относительно пространственно-временной инверсии, поскольку является дифференциальным уравнением второго порядка как по временной, так и по пространственным производным. В присутствии внешних полей указанная инвариантность нарушается. Симметрия волновой функции начинает зависеть от симметричных свойств внешних полей.

Зарядово-сопряженная частица характеризуется противоположным знаком как заряда, так и магнетона μ_0 , поэтому уравнение для зарядово-сопряженной частицы имеет вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu + \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi_C = -\mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \Psi_C. \quad (7.96)$$

Несложно видеть, что, в отличие от случая скалярной частицы, ни уравнение, комплексно сопряженное с (7.2):

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu + \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi^* = \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma}^* \mathbf{B} + i \boldsymbol{\alpha}^* \mathbf{E}) \Psi^*, \quad (7.97)$$

ни уравнение для сопряженной волновой функции $\bar{\Psi}$

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu + \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \bar{\Psi} = \mu_0 \bar{\Psi} (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}), \quad (7.98)$$

не совпадают с уравнением (7.96). В свете вышеприведенного обсуждения это и неудивительно, поскольку размерность пространства состояний спинорной частицы отличается от размерности пространства состояний скалярной частицы.

В настоящем разделе мы будем использовать стандартное представление матриц γ_μ , поскольку унитарное преобразование матриц γ_μ позволяет записать полученные ниже выражения в произвольном представлении.

При преобразованиях пространственной инверсии, обращения времени и зарядового сопряжения уравнение (7.2) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p}' - \frac{q'_0}{c} \mathbf{A}'(\mathbf{r}', t') \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - q'_0 \varphi'(\mathbf{r}', t') \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi'(\mathbf{r}', t') = \\ = \mu'_0 (\boldsymbol{\Sigma}' \mathbf{B}'(\mathbf{r}', t') - i \boldsymbol{\alpha}' \mathbf{E}'(\mathbf{r}', t')) \Psi'(\mathbf{r}', t'). \end{aligned} \quad (7.99)$$

Преобразования симметрии $\Psi(\mathbf{r}, t) = U \Psi'(\mathbf{r}', t')$, возвращающие уравнение (7.99) к исходному виду (7.2), означают наличие или отсутствие симметрии в характере движения частицы, античастицы или

зарядово-сопряженной частицы. Как мы отмечали выше, размерность пространства состояний спинорной частицы отличается от размерности состояний скалярной частицы, поэтому при преобразованиях симметрии может изменяться не только знак нормы (т.е. знак плотности заряда), но и другие характеристики состояния частицы. Это нам дает дополнительные возможности идентификации состояний.

7.7.1. Преобразования P_1 и T_1 . Поскольку трансляционная часть уравнения (7.99) совпадает с трансляционной частью уравнения КГФ, то ясно, что связь преобразований аргументов волновой функции с симметричными свойствами внешних полей имеет тот же вид, что и для скалярной волновой функции уравнения КГФ. Возникающие отличия связаны лишь с преобразованием формы многокомпонентной волновой функции уравнения (7.99). Поэтому будем следовать рассмотрению, приведенному в разделе 4.3.1, и определим операции пространственной инверсии P_1 и обращения времени T_1 следующими соотношениями:

$$P_1 \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(-\mathbf{r}, t), \quad T_1 \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, -t). \quad (7.100)$$

В гл. 4 мы видели, что трансляционная часть уравнения (7.99) возвращается к исходному виду при следующих симметричных свойствах внешних полей:

$$P_1: \quad \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(-\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t), \quad (7.101)$$

$$T_1: \quad \mathbf{A}'(\mathbf{r}, -t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(\mathbf{r}, -t) = -\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (7.102)$$

Отсюда следует

$$P_1: \quad \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (7.103)$$

$$T_1: \quad \mathbf{E}'(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(\mathbf{r}, -t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t). \quad (7.104)$$

Учитывая последние соотношения, несложно видеть, что матрицы U преобразования формы волновой функции $U\Psi'(\mathbf{r}', t') = \Psi(\mathbf{r}, t)$ будут определяться решением одних и тех же матричных уравнений. Эти уравнения имеют вид

$$U\Sigma U^{-1} = \Sigma, \quad U\boldsymbol{\alpha}U^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}. \quad (7.105)$$

Матричные уравнения (7.105) имеют следующие два решения:

$$U_1 = \gamma_4, \quad U_2 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3. \quad (7.106)$$

Отметим, что преобразование P_1 не затрагивает временной части волновой функции, поэтому преобразованная волновая функция относится к той же зоне состояний, что и исходная. Напротив, преобразование T_1 связывает положительно частотные решения с отрицательно частотными, поэтому преобразованная волновая функция относится к зоне состояний, отличной от исходной. Как следует из (7.106), матрица U_1 не меняет знака нормы волновой функции, а матрица U_2 меняет.

Для того чтобы связать матрицы (7.106) с одним из преобразований (7.100), необходимо исследовать, к каким изменениям состояния частицы по внутренним степеням свободы приводит их действие. Положим, что матрица U_1 отвечает матрице преобразования пространственной инверсии, а матрица U_2 — преобразованию обращения времени:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U_P^{(1)} \Psi(-\mathbf{r}, t) = \gamma_4 \Psi(-\mathbf{r}, t), \quad (7.107)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U_T^{(1)} \Psi(\mathbf{r}, -t) = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \Psi(\mathbf{r}, -t). \quad (7.108)$$

В правильности интерпретации решений (7.106) можно убедиться, анализируя законы преобразования векторов магнитной и электрической поляризации. Например, используя (7.107), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(-\mathbf{r}, t) &= \bar{\Psi}(-\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\Sigma} \Psi(-\mathbf{r}, t) = \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \gamma_4 \boldsymbol{\Sigma} \gamma_4 \Psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\Sigma} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(-\mathbf{r}, t) &= -i \bar{\Psi}(-\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi(-\mathbf{r}, t) = -i \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \gamma_4 \boldsymbol{\alpha} \gamma_4 \Psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= i \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{P}(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Как видно, закон преобразования билинейных комбинаций \mathbf{M} и \mathbf{P} согласуется с законом преобразования векторов магнитной и электрической поляризации при операции пространственной инверсии, поскольку в соответствии с физическим смыслом указанных величин вектор \mathbf{M} является аксиальным вектором, а вектор \mathbf{P} — полярным. Аналогично, используя (7.108), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{r}, -t) &= \bar{\Psi}(\mathbf{r}, -t) \boldsymbol{\Sigma} \Psi(\mathbf{r}, -t) = -\bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \gamma_3 \gamma_2 \gamma_1 \boldsymbol{\Sigma} \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \Psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= -\bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\Sigma} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{M}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}, -t) &= -i \bar{\Psi}(\mathbf{r}, -t) \boldsymbol{\alpha} \Psi(\mathbf{r}, -t) = i \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \gamma_3 \gamma_2 \gamma_1 \boldsymbol{\alpha} \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \Psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= -i \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что закон преобразования билинейных комбинаций \mathbf{M} и \mathbf{P} согласуется с законом преобразования векторов магнитной и электрической поляризации при операции обращения времени.

Таким образом, исследование законов преобразования векторов магнитной и электрической поляризации, определяющих состояние частицы по внутренним степеням свободы, позволяет отождествить каждую из двух матриц (6.86) с ее преобразованием симметрии.

7.7.2. Преобразования P_2 и T_2 . Следуя разделу 4.3.1, определим преобразования P_2 и T_2 следующим образом:

$$P_2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(-\mathbf{r}, t), \quad T_2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, -t). \quad (7.109)$$

Трансляционная часть уравнения (7.99) совпадает с трансляционной частью уравнения (7.2) при выполнении условий (4.88)–(4.89):

$$\begin{aligned} P_2: \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), & \varphi'(-\mathbf{r}, t) &= -\varphi(\mathbf{r}, t), \\ T_2: \mathbf{A}'(\mathbf{r}, -t) &= -\mathbf{A}(\mathbf{r}, -t), & \varphi'(\mathbf{r}, -t) &= \varphi(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Отсюда следует

$$P_2: \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, t) = -\mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (7.110)$$

$$T_2: \mathbf{E}'(\mathbf{r}, -t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{B}(\mathbf{r}, t). \quad (7.111)$$

Аналогично предыдущему случаю, матрицы обоих преобразований (7.109) являются решениями одних и тех же матричных уравнений

$$U\Sigma^*U^{-1} = -\Sigma, \quad U\boldsymbol{\alpha}^*U^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}. \quad (7.112)$$

Система матричных уравнений (7.112) имеет следующие два решения:

$$U_1 = \gamma_3\gamma_1, \quad U_2 = \gamma_4\gamma_2. \quad (7.113)$$

Как видно из (7.109), преобразование P_2 связывает положительно частотные решения с отрицательно частотными, а преобразование T_2 знака частотности решения не меняет. Следовательно, учитывая, что матрица U_1 оставляет неизменным знак нормы волновой функции, а матрица U_2 его меняет, для преобразований (7.109) получаем

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U_T^{(2)}\Psi^*(\mathbf{r}, -t) = \gamma_3\gamma_1\Psi^*(\mathbf{r}, -t), \quad (7.114)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U_P^{(2)}\Psi^*(-\mathbf{r}, t) = \gamma_4\gamma_2\Psi^*(-\mathbf{r}, t). \quad (7.115)$$

Так же как и в предыдущем разделе, для того чтобы убедиться в правильности выбора решений, мы можем проанализировать законы преобразования билинейных комбинаций. Используя (7.114), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{r}, -t) &= \bar{\Psi}(\mathbf{r}, -t)\Sigma\Psi(\mathbf{r}, -t) = \\ &= \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t)\gamma_1\gamma_3\gamma_4\Sigma\gamma_3\gamma_1\Psi^*(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{M}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}, -t) &= -i\bar{\Psi}(\mathbf{r}, -t)\boldsymbol{\alpha}\Psi(\mathbf{r}, -t) = \\ &= -i\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t)\gamma_1\gamma_3\gamma_4\boldsymbol{\alpha}\gamma_3\gamma_1\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Таким образом, законы преобразования векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} при преобразованиях (7.114) соответствуют законам преобразования векторов магнитной и электрической поляризации при операции обращения времени.

Аналогично, используя (7.115), получаем

$$\mathbf{M}(-\mathbf{r}, t) = \bar{\Psi}(-\mathbf{r}, t)\Sigma\Psi(-\mathbf{r}, t) = \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t)\gamma_2\Sigma\gamma_4\gamma_2\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M}(\mathbf{r}, t),$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(-\mathbf{r}, t) &= -i\bar{\Psi}(-\mathbf{r}, t)\boldsymbol{\alpha}\Psi(-\mathbf{r}, t) = \\ &= -i\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t)\gamma_2\boldsymbol{\alpha}\gamma_4\gamma_2\Psi^*(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{P}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

что также согласуется с законами преобразования векторов магнитной и электрической поляризации при операции пространственной инверсии.

7.7.3. Преобразования $P_i T_j$. При последовательном применении операций T_1 и P_1 потенциалы полей преобразуются следующим образом:

$$P_1 T_1: \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(-\mathbf{r}, -t) = -\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (7.116)$$

откуда получаем

$$P_1 T_1: \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, -t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, -t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t). \quad (7.117)$$

Точно такие же преобразования потенциалов соответствуют и операции $P_2 T_2$. Подставляя (7.116) и (7.117) в (7.99), несложно видеть, что уравнение (7.99) совпадает в этом случае с уравнением (7.2), поэтому волновые функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$, $\hat{P}_1 \hat{T}_1 \Psi(\mathbf{r}, t)$ и $\hat{P}_2 \hat{T}_2 \Psi(\mathbf{r}, t)$ являются одновременно решениями уравнения (7.2). С другой стороны,

$$\begin{aligned} \hat{P}_1 \hat{T}_1 \Psi(\mathbf{r}, t) &= U_P^{(1)} U_T^{(1)} \Psi(-\mathbf{r}, -t) = -\gamma_5 \Psi(-\mathbf{r}, -t), \\ \hat{P}_2 \hat{T}_2 \Psi(\mathbf{r}, t) &= U_P^{(2)} U_T^{(2)*} \Psi(-\mathbf{r}, -t) = -\gamma_5 \Psi(-\mathbf{r}, -t). \end{aligned}$$

Оба рассматриваемых преобразования связаны с заменой положительно частотных решений на отрицательно частотные. Матрицей указанных преобразований является матрица γ_5 , которая меняет знак нормы волновой функции. Таким образом, при симметрии внешнего электромагнитного поля, определяющейся соотношениями (7.116), (7.117), оператор γ_5 устанавливает связь между положительно и отрицательно частотными решениями с противоположным знаком нормы волновой функции.

Последовательное применение операций T_2 и P_1 приводит к следующему закону преобразования потенциалов поля:

$$P_1 T_2: \mathbf{A}'(-\mathbf{r}, -t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \varphi'(-\mathbf{r}, -t) = \varphi(\mathbf{r}, t) \quad (7.118)$$

и векторов напряженности полей

$$P_1 T_2: \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{B}(\mathbf{r}, t).$$

Уравнение (7.99) принимает в этом случае вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi^*(-\mathbf{r}, -t) = -\mu_0 (\boldsymbol{\Sigma}^* \mathbf{B} + i \boldsymbol{\alpha}^* \mathbf{E}) \Psi^*(-\mathbf{r}, -t). \quad (7.119)$$

Преобразование, возвращающее последнее уравнение к исходному виду (7.2), имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U_P^{(1)} U_T^{(2)} \Psi^*(-\mathbf{r}, -t) = \gamma_4 \gamma_3 \gamma_1 \Psi^*(-\mathbf{r}, -t). \quad (7.120)$$

Аналогично, для преобразования $P_2 T_1$ получаем

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = U_P^{(2)} U_T^{(1)*} \Psi^*(-\mathbf{r}, -t) = -\gamma_4 \gamma_3 \gamma_1 \Psi^*(-\mathbf{r}, -t).$$

Преобразование $P_1 T_2$ не меняет частотности решения, поэтому соотношение (7.120) отражает симметричные свойства решений, относящихся к одной зоне состояний.

7.7.4. Зарядовое сопряжение. Сравним уравнение для комплексно сопряженной волновой функции (7.97) с уравнением для зарядово-сопряженной частицы (7.96). Определяя матрицу зарядового сопряжения U_C соотношением

$$\Psi_C(\mathbf{r}, t) = U_C \Psi^*(\mathbf{r}, t),$$

получаем для нее следующие уравнения

$$U_C \Sigma^* U_C^{-1} = -\Sigma, \quad U_C \boldsymbol{\alpha}^* U_C^{-1} = \boldsymbol{\alpha}. \quad (7.121)$$

Учитывая определение матриц Σ и $\boldsymbol{\alpha}$, получаем

$$\begin{aligned} U_C \gamma_1 \gamma_2 U_C^{-1} &= -\gamma_1 \gamma_2, & U_C \gamma_4 \gamma_1 U_C^{-1} &= \gamma_4 \gamma_1, \\ U_C \gamma_2 \gamma_3 U_C^{-1} &= -\gamma_2 \gamma_3, & U_C \gamma_4 \gamma_2 U_C^{-1} &= -\gamma_4 \gamma_2, \\ U_C \gamma_3 \gamma_1 U_C^{-1} &= \gamma_3 \gamma_1, & U_C \gamma_4 \gamma_3 U_C^{-1} &= \gamma_4 \gamma_3. \end{aligned} \quad (7.122)$$

Система матричных уравнений (7.122) имеет следующие два решения

$$U_C^{(1)} = \gamma_2, \quad U_C^{(2)} = \gamma_4 \gamma_3 \gamma_1. \quad (7.123)$$

Матрица $U_C^{(1)}$ меняет знак нормы волновой функции, а матрица $U_C^{(2)}$ не меняет. Отметим также, что матрица $U_C^{(2)}$ совпадает с матрицей $U_P^{(1)} U_T^{(2)}$.

7.7.5. CPT-преобразование. Определим операции обращения времени \hat{T} , пространственной инверсии \hat{P} и зарядового сопряжения \hat{C} следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \hat{T} \Psi(\mathbf{r}, t) &= U_T^{(2)} \Psi^*(\mathbf{r}, -t), \\ \hat{P} \Psi(\mathbf{r}, t) &= U_P^{(1)} \Psi(-\mathbf{r}, t), \\ \hat{C} \Psi(\mathbf{r}, t) &= U_C^{(1)} \Psi^*(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (7.124)$$

Тогда для CPT -преобразования получаем

$$\begin{aligned}\widehat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \gamma_3\gamma_1\Psi^*(\mathbf{r}, -t), \\ \widehat{P}\widehat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \gamma_4\gamma_3\gamma_1\Psi^*(-\mathbf{r}, -t), \\ \widehat{C}\widehat{P}\widehat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \gamma_2\gamma_4\gamma_3\gamma_1\Psi(-\mathbf{r}, -t) = \gamma_5\Psi(-\mathbf{r}, -t).\end{aligned}$$

Таким образом, CPT -преобразование, связывающее волновую функцию зарядово-сопряженной частицы с обращенной во времени и пространстве волновой функцией частицы, имеет вид

$$\Psi_C^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \widehat{C}\widehat{P}\widehat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) = \lambda_{CPT}\gamma_5\Psi(-\mathbf{r}, -t).$$

Отметим, что все матрицы преобразований U были определены с точностью до фазы, поэтому $|\lambda_{CPT}| = 1$ — коэффициент, учитывающий возможность переопределения фаз.

Используя вторую из матриц (7.123), получаем

$$\Psi_C^{(2)}(\mathbf{r}, t) = \Psi(-\mathbf{r}, -t).$$

Следовательно, $\Psi_C^{(2)} = \gamma_5\Psi_C^{(1)}$. Поскольку оператор γ_5 коммутирует с оператором уравнения (7.2), то получившееся соотношение отражает общее свойство уравнения (7.2): если волновая функция $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения (7.2), то и волновая функция $\gamma_5\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ также является решением этого уравнения.

Выше мы показали, что операция зарядового сопряжения уравнения (7.2) осуществляется двумя матрицами: $U_C^{(1)} = \gamma_2$ и $U_C^{(2)} = \gamma_4\gamma_3\gamma_1$, которые обладают различными трансформационными свойствами. Матрица $U_C^{(2)}$ коммутирует с оператором γ_4 , а матрица $U_C^{(1)}$ не коммутирует, поэтому одна из матриц оставляет неизменным знак нормы волновой функции, а вторая нет. Квадрат матрицы $U_C^{(1)}$ равен единице, поэтому двукратное действие матрицы $U_C^{(1)}$ возвращает волновую функцию в исходное состояние. С другой стороны, квадрат матрицы $U_C^{(2)}$ равен минус единице, поэтому двукратное действие этой матрицы на волновую функцию меняет фазу волновой функции на π . Неудивительно поэтому, что последовательное действие указанных двух матриц на волновую функцию переводит частицу в состояние, отличное от исходного. Действительно, произведение матриц имеет вид: $U_C^{(1)}U_C^{(2)} = \gamma_5$, т.е. совпадает с матрицей CPT -преобразования, связывающей волновую функцию зарядово-сопряженной частицы с обращенной во времени и пространстве волновой функцией частицы.

7.7.6. Комбинированная PT -четность. При анализе симметричных свойств задач о взаимодействии частицы с внешними волновыми электромагнитными полями удобно ввести понятие комбиниро-

ванной PT -четности. Преобразования комбинированной PT -четности определяются следующими соотношениями:

$$(PT)_1: A'_\mu(-x) = -A_\mu(x), \quad (7.125)$$

$$(PT)_2: A'_\mu(-x) = A_\mu(x), \quad (7.126)$$

где $x = (\mathbf{r}, ict)$. Для электромагнитных полей, симметрия которых определяется соотношением (7.125), получаем

$$(PT)_1: \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, -t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, -t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t).$$

Несложно видеть, что в полях с симметрией $(PT)_1$ вид уравнения (7.2) не меняется, поэтому $\Psi(\mathbf{r}, t)$ и $\Psi(-\mathbf{r}, -t)$ являются одновременно решениями уравнения.

В полях с симметрией (7.126)

$$(PT)_2: \mathbf{E}'(-\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}'(-\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{B}(\mathbf{r}, t),$$

и уравнение (7.2) принимает вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(p_\mu + \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \Psi(-\mathbf{r}, -t) = -\mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \Psi(-\mathbf{r}, -t). \quad (7.127)$$

Несложно видеть, что последнее уравнение совпадает с уравнением для зарядово-сопряженной частицы.

Таким образом, так же как и в случае частицы со спином нуль, в электромагнитных полях с симметрией (7.125) движение частицы в преобразованном поле совпадает с движением частицы в исходном поле, в то время как в полях с симметрией (7.126) движение частицы в преобразованном поле совпадает с движением зарядово-сопряженной частицы в исходном поле.

Отметим в заключение данного раздела, что, в отличие от CPT -преобразований уравнений, линейных по оператору p_4 , каждому из указанных преобразований уравнения (7.2) отвечают две матрицы преобразований. Это связано с тем, что пространство состояний спинорных материальных полей, описываемых уравнением второго порядка по временной производной, так же как и в случае скалярных полей, вдвое шире пространства состояний уравнений спинорных материальных полей, линейных по оператору p_4 . Действительно, как мы видели выше, положительно частотные решения отвечают состояниям как частицы, так и античастицы. В свою очередь, отрицательно частотные решения также включают как состояния зеркальной частицы, так и состояния зеркальной античастицы. При этом каждому из перечисленных состояний отвечают два состояния спиральности, которая, наряду с пространственными квантовыми числами, однозначно определяет состояние спинорного материального поля в рамках теорий, линейных по оператору p_4 .

7.8. Частица и античастица

Итак, согласно введенному выше определению, состояния частицы и античастицы отвечают положительному и отрицательному собственным значениям оператора γ_4 соответственно. Как мы уже отмечали ранее, такая трактовка термина «античастица» отличается от традиционной, поскольку она не связывает указанное состояние с решениями уравнения для волновой функции, сопряженной волновой функции уравнения для частицы. Сравним характеристики полей в состоянии частицы и античастицы.

Пусть волновая функция $\Psi_p(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения (7.2), отвечающим положительной норме волновой функции, тогда, учитывая вышесказанное, волновую функцию

$$\Psi_a(\mathbf{r}, t) = \gamma_5 \Psi_p(\mathbf{r}, t) \quad (7.128)$$

можно связать с состоянием античастицы. При этом обе функции, Ψ_p и Ψ_a , являются решением одного и того же уравнения (7.2), поскольку оператор γ_5 коммутирует с оператором уравнения (7.2). Волновая функция, сопряженная Ψ_a , имеет вид

$$\bar{\Psi}_a(\mathbf{r}, t) = -\bar{\Psi}_p(\mathbf{r}, t) \gamma_5.$$

Следовательно,

$$\bar{\Psi}_a(\mathbf{r}, t) \hat{L} \Psi_a(\mathbf{r}, t) = \mp \bar{\Psi}_p(\mathbf{r}, t) \hat{L} \Psi_p(\mathbf{r}, t). \quad (7.129)$$

Знак минус в (7.129) относится к случаю, когда оператор \hat{L} коммутирует с оператором γ_5 , а знак плюс относится к случаю $\hat{L}\gamma_5 + \gamma_5\hat{L} = 0$. Поэтому, например,

$$\begin{aligned} N_a(\mathbf{r}, t) &= -N_p(\mathbf{r}, t), & \mathbf{P}_a(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{P}_p(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{M}_a(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{M}_p(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (7.130)$$

Соотношения (7.130) наглядно демонстрируют, что, определяя состояния античастицы в соответствии с (7.128), мы получаем желаемое соотношение между наблюдаемыми величинами для частицы и античастицы, т. е. при заданной величине констант q_0 и μ_0 в уравнении (7.2) состояние античастицы характеризуется противоположными значениями плотности заряда и направлений векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} . При этом оба состояния, «частица» и «античастица», относятся к зоне положительно частотных решений.

Итак, общее положительно частотное решение уравнения (7.2) для случая свободной частицы, отвечающее заданной величине импульса и энергии частицы, можно записать в следующем виде:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma=\pm 1} (A_{\mathbf{p},\sigma} + B_{\mathbf{p},\sigma} \gamma_5) \psi^{(\sigma)} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t), \quad (7.131)$$

где

$$u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_{\mathbf{p}}}} \exp \left[-i \frac{(E_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p} \mathbf{r})}{\hbar} \right]$$

и

$$\psi^{(\sigma)} = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.132)$$

Согласно принятому определению биспиноры

$$\psi_1 = \psi^{(+)} = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = \psi^{(-)} = \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix}$$

отвечают состоянию частицы, а биспиноры

$$\psi_3 = -\gamma_5 \psi^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = -\gamma_5 \psi^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(-)} \end{pmatrix}$$

— состоянию античастицы.

Учитывая, что пространственные волновые функции нормированы условием

$$\frac{E_{\mathbf{p}} + E_{\mathbf{p}'}}{2m_0 c^2} \int u_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}, t) u_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t) dV = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

получаем

$$\sum_{\sigma=\pm 1} (|A_{\mathbf{p},\sigma}|^2 - |B_{\mathbf{p},\sigma}|^2) = 1. \quad (7.133)$$

Коэффициенты $A_{\mathbf{p},\sigma}$ и $B_{\mathbf{p},\sigma}$ суть амплитуды состояний частицы и античастицы соответственно. Таким образом, мы видим, что условие нормировки волновой функции не фиксирует суммарного числа частиц и античастиц, участвующих в процессе. Фиксируется лишь полный заряд

$$q = q_0 \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\sigma=\pm 1} (|A_{\mathbf{p},\sigma}|^2 - |B_{\mathbf{p},\sigma}|^2)$$

и полная энергия

$$E = \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \sum_{\sigma=\pm 1} (|A_{\mathbf{p},\sigma}|^2 - |B_{\mathbf{p},\sigma}|^2)$$

системы.

Итак, мы видим, что в теории спинорных полей состояния «частицы» и «античастицы» формируют две подзоны зоны положительного частотных состояний, каждая из которых в свою очередь может расщепляться, если снято вырождение по направлению спина частицы. При этом зона отрицательно частотных решений также содержит подзоны, отвечающие состояниям «зеркальных частиц» и «зеркальных античастиц».

Остановимся на трансформационных свойствах волновых функций частиц $\Psi_p(\mathbf{r}, t)$ и античастиц $\Psi_a(\mathbf{r}, t) = \gamma_5 \Psi_p(\mathbf{r}, t)$ при преобразованиях (7.124).

В центрально-симметричном внешнем поле волновые функции четных $\Psi_p^{(+)}$ и нечетных $\Psi_p^{(-)}$ состояний преобразуются следующим образом:

$$P_1 \Psi_p^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) = \gamma_4 \Psi_p^{(\pm)}(-\mathbf{r}, t) = \pm \Psi_p^{(\pm)}(\mathbf{r}, t).$$

Волновые функции античастицы $\gamma_5 \Psi_p^{(\pm)}$ при операции пространственной инверсии преобразуются к виду

$$P_1 (\gamma_5 \Psi_p^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)) = \gamma_4 \gamma_5 \Psi_p^{(\pm)}(-\mathbf{r}, t) = -\gamma_5 P_1 \Psi_p^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) = \mp \gamma_5 \Psi_p^{(\pm)}(\mathbf{r}, t).$$

Таким образом,

$$P_1 \Psi_a^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) = \gamma_4 \Psi_a^{(\pm)}(-\mathbf{r}, t) = \mp \Psi_a^{(\pm)}(\mathbf{r}, t). \quad (7.134)$$

Следовательно, состояния частицы и античастицы имеют противоположную внутреннюю четность.

Операция обращения времени имеет вид

$$T_2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \gamma_1 \gamma_3 \Psi^*(\mathbf{r}, -t). \quad (7.135)$$

Возьмем в качестве волновой функции $\Psi_p(\mathbf{r}, t)$ волновую функцию свободной частицы

$$\Psi_p(\mathbf{r}, t) = \Psi_{\mathbf{p}, \sigma = \pm 1}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} w_{\mathbf{p}}^{(\sigma = \pm 1)} \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left(-i \frac{E_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right), \quad (7.136)$$

Применяя преобразование (7.135) к волновой функции (7.136), получаем

$$T_2 \Psi_{\mathbf{p}, \sigma = \pm 1}(\mathbf{r}, t) = \mp i \Psi_{-\mathbf{p}, \sigma = \pm 1}(\mathbf{r}, t), \quad (7.137)$$

т. е. волновая функция $\widehat{T} \Psi_p$ описывает обращенное во времени движение, поскольку импульс частицы меняется на противоположный. Поскольку $\gamma_5^* = \gamma_5$ и оператор γ_5 коммутирует с произведением $\gamma_\mu \gamma_\nu$, то преобразования волновой функции античастицы $\gamma_5 \Psi_{\mathbf{p}, \sigma}$ совпадают с (7.137).

Операция зарядового сопряжения определяется выражением

$$\widehat{C} \Psi(\mathbf{r}, t) = \gamma_2 \Psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (7.138)$$

Применяя (7.119) к волновой функции (7.136), получаем

$$\widehat{C} \Psi_{\mathbf{p}, \sigma = \pm 1}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \mp \Psi_{\mathbf{p}, \sigma = \mp 1}^{(-)}(\mathbf{r}, t), \quad (7.139)$$

где

$$\Psi_{\mathbf{p}, \sigma}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} w_{\mathbf{p}}^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left(-i \frac{E_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right)$$

и

$$\Psi_{\mathbf{p},\sigma}^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ w_{\mathbf{p}}^{(\sigma)} \end{pmatrix} \exp\left(i\frac{E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right).$$

Таким образом, операция зарядового сопряжения связывает состояния частицы и зеркальной античастицы. Поскольку оператор зарядового сопряжения (7.138) пропорционален первой степени матриц γ_{μ} , а именно γ_2 , то волновые функции частиц и античастиц при зарядовом сопряжении преобразуются с разным знаком. Волновая функция $\Psi_C(\mathbf{r}, t) = \gamma_2\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ при операции пространственной инверсии преобразуется следующим образом:

$$\hat{P}\Psi_C(\mathbf{r}, t) = -\gamma_2\hat{P}\Psi^*(\mathbf{r}, t),$$

поэтому внутренняя четность частицы и зеркальной античастицы также противоположны.

В вышеприведенных рассуждениях мы полагали, что состоянию зеркальной частицы также отвечает биспинорная волновая функция с отличным от нуля верхним спинором. Возможно и альтернативное определение состояния зеркальных частиц и античастиц. Однако в рамках модели свободных частиц нет каких-либо оснований для того, чтобы отдать предпочтение тому или иному определению.

Глава 8

ОРТОГОНАЛЬНЫЕ БИСПИНОРЫ (КВАРТИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ)

В предыдущей главе мы обсудили специфику состояний свободной частицы, описываемой уравнением (7.2). Движение свободной частицы — это изменение ее состояния по трансляционным степеням свободы, например пространственное перемещение волнового пакета, при этом состояние по внутренним степеням свободы остается неизменным. Как видно из структуры уравнения (7.2), изменение состояния частицы по внутренним степеням свободы происходит лишь при взаимодействии частицы с электромагнитным полем. Настоящая глава посвящена анализу общих свойств решений уравнения (7.2) для частицы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем. Конкретные задачи движения частицы во внешних электрических и магнитных полях будут рассмотрены в последующих главах.

Отметим, что в настоящей главе, так же как и ранее, мы будем использовать, в основном, стандартное представление матриц γ_μ , поскольку это облегчает сравнение с результатами нерелятивистской теории частиц с полуцелым спином. Переход к произвольному представлению осуществляется унитарным преобразованием биспинорной волновой функции $\Psi' = U\Psi$, при этом $\gamma' = U\gamma U^{-1}$.

8.1. Собственные решения спиновой части уравнения

Запишем уравнение (7.2) в следующем тождественном виде:

$$H_0\Psi(x) = \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B}(x) - i\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}(x)) \Psi(x), \quad (8.1)$$

где H_0 — трансляционная часть оператора уравнения (7.2), совпадающая по виду с оператором уравнения КГФ,

$$H_0 = \frac{1}{2m_0} (P_\mu P_\mu + m_0^2 c^2). \quad (8.2)$$

Правая часть уравнения (8.1) зависит от спиновых операторов и определяет ориентационное взаимодействие частицы с внешним электромагнитным полем, т. е. изменение состояния по внутренним степеням свободы, определяющееся направлением векторов электрической и магнитной поляризации. Поскольку матрицы γ_μ имеют блочную структуру и выражаются через спиновые матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma}$ и единичную матрицу

размерности 2×2 , то общее решение уравнения (8.1) можно записать в виде

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^4 \psi_n(x) g_n(x),$$

где биспиноры $\psi_n(x)$ являются собственными функциями задачи на собственные значения для спинового оператора, стоящего в правой части уравнения (8.1):

$$(\Sigma \mathbf{B} - i\alpha \mathbf{E}) \psi_n = \lambda_n \psi_n. \quad (8.3)$$

Несложно видеть, что собственные значения λ_n являются в общем случае комплексными, поэтому уравнение для сопряженного биспинора $\bar{\psi}_m$ имеет вид

$$\bar{\psi}_m (\Sigma \mathbf{B} - i\alpha \mathbf{E}) = \lambda_m^* \bar{\psi}_m. \quad (8.4)$$

Умножая уравнение (8.3) слева на $\bar{\psi}_m$, а уравнение (8.4) справа на ψ_n и взяв разность получившихся выражений, имеем

$$(\lambda_m^* - \lambda_n) \bar{\psi}_m \psi_n = 0. \quad (8.5)$$

Таким образом, собственные решения, отвечающие собственным значениям $\lambda_m \neq \lambda_n^*$, являются ортогональными. В частности, при $m = n$ получаем

$$\text{Im}(\lambda_n) \cdot \bar{\psi}_n \psi_n = 0.$$

Следовательно, при $\text{Im}(\lambda_n) \neq 0$ имеем

$$\bar{\psi}_n \psi_n = 0. \quad (8.6)$$

При $\lambda_m = \lambda_n^*$ получаем

$$\bar{\psi}_m \psi_n \neq 0. \quad (8.7)$$

Запишем биспинор ψ_n в виде

$$\psi_n = \begin{pmatrix} u_n \\ d_n \end{pmatrix}.$$

Подставляя это выражение в (8.3), получаем

$$\begin{aligned} (\sigma \mathbf{B} - i\sigma \mathbf{E}) (u_n + d_n) &= \lambda_n (u_n + d_n), \\ (\sigma \mathbf{B} + i\sigma \mathbf{E}) (u_n - d_n) &= \lambda_n (u_n - d_n). \end{aligned} \quad (8.8)$$

Решение задачи на собственные значения

$$(\sigma \mathbf{B} - i\sigma \mathbf{E}) w_n = \lambda_n w_n$$

имеет вид

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{\mathbf{B}^2 - \mathbf{E}^2 - 2i\mathbf{B}\mathbf{E}} = \pm \sqrt{(\mathbf{B} - i\mathbf{E})^2} = \pm \Gamma, \quad (8.9)$$

$$w_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_1 \end{pmatrix}, \quad w_2 = \begin{pmatrix} \eta_2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (8.10)$$

где

$$\eta_1 = \frac{B_x - iE_x + i(B_y - iE_y)}{\Gamma + B_z - iE_z}, \quad \eta_2 = -\frac{B_x - iE_x - i(B_y - iE_y)}{\Gamma + B_z - iE_z}. \quad (8.11)$$

Решение задачи на собственные значения

$$(\sigma \mathbf{B} + i\sigma \mathbf{E}) w_n = \lambda_n w_n$$

отличается от (8.9)–(8.11) знаком \mathbf{E} , поэтому получаем

$$\lambda_{3,4} = \pm \sqrt{(\mathbf{B} + i\mathbf{E})^2} = \pm \Gamma^*, \quad (8.12)$$

$$w_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_3 \end{pmatrix}, \quad w_4 = \begin{pmatrix} \eta_4 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (8.13)$$

$$\eta_3 = \frac{B_x + iE_x + i(B_y + iE_y)}{\Gamma^* + B_z + iE_z}, \quad \eta_4 = -\frac{B_x + iE_x - i(B_y + iE_y)}{\Gamma^* + B_z + iE_z}. \quad (8.14)$$

Введем обозначения:

$$\cos \Theta(x) = \frac{B_z - iE_z}{\Gamma} \quad (8.15)$$

и

$$\cos \Phi(x) = \frac{B_x - iE_x}{\sqrt{(B_x - iE_x)^2 + (B_y - iE_y)^2}}. \quad (8.16)$$

Используя (8.15)–(8.16), получаем

$$\eta_{1,2} = \pm \frac{\sin \Theta/2}{\cos \Theta/2} \exp(\pm i\Phi), \quad \eta_{3,4} = \pm \frac{\sin \Theta^*/2}{\cos \Theta^*/2} \exp(\pm i\Phi^*).$$

Таким образом, спиноры w_n можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} w_1 &= \begin{pmatrix} \exp(-i\Phi/2) \cos \Theta/2 \\ \exp(i\Phi/2) \sin \Theta/2 \end{pmatrix}, & w_2 &= \begin{pmatrix} -\exp(-i\Phi/2) \sin \Theta/2 \\ \exp(i\Phi/2) \cos \Theta/2 \end{pmatrix}, \\ w_3 &= \begin{pmatrix} \exp(-i\Phi^*/2) \cos \Theta^*/2 \\ \exp(i\Phi^*/2) \sin \Theta^*/2 \end{pmatrix}, & w_4 &= \begin{pmatrix} -\exp(-i\Phi^*/2) \sin \Theta^*/2 \\ \exp(i\Phi^*/2) \cos \Theta^*/2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Учитывая (8.8), биспиноры, являющиеся собственными решениями уравнения (8.3) и соответствующие собственным значениям (8.9) и (8.12), можно записать в виде

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_1 \end{pmatrix}, & \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_2 \\ w_2 \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_3 \\ -w_3 \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_4 \\ -w_4 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Биспиноры ψ_n удовлетворяют следующим правилам ортогональности:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_n \psi_n &= 0, & \bar{\psi}_1 \psi_2 &= 0, & \bar{\psi}_1 \psi_3 &= 1, \\ \bar{\psi}_1 \psi_4 &= 0, & \bar{\psi}_2 \psi_3 &= 0, & \bar{\psi}_2 \psi_4 &= 1, & \bar{\psi}_3 \psi_4 &= 0, \end{aligned} \quad (8.19)$$

которые, впрочем, следуют и из общей формулы (8.5). Четыре ортогональных биспинора (8.18) можно охарактеризовать двумя бинарными квантовыми числами, являющимися собственными значениями операторов γ_μ или их произведений. Например, несложно видеть, что биспиноры (8.18) являются собственными функциями оператора γ_5 и отвечают следующим его собственным значениям:

$$\gamma_5\psi_{1,2} = -\psi_{1,2}, \quad \gamma_5\psi_{3,4} = \psi_{3,4}.$$

В случае свободной частицы в качестве второго бинарного квантового числа мы выбрали собственные значения оператора спиральности. Однако, как видно из вышеприведенного анализа, это квантовое число не является удобным для характеристики состояния частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем. Конкретный выбор пары бинарных квантовых чисел мы будем осуществлять на основе различных задач взаимодействия частиц с электромагнитным полем.

8.2. Свойства собственных функций и собственных значений

Отметим ряд свойств полученных собственных решений, которые являются непосредственным следствием математической формы уравнения (7.2) и дают наглядное представление об общих свойствах решений указанного уравнения.

8.2.1. Инвариантность собственных значений. Хорошо известно, что инвариантами электромагнитного поля являются следующие:

$$F_{\mu\nu}F_{\nu\mu} = F'_{\mu\nu}F'_{\nu\mu}, \quad (8.20)$$

$$e_{\mu\nu\rho\sigma}F_{\sigma\rho}F_{\nu\mu} = e_{\mu\nu\rho\sigma}F'_{\sigma\rho}F'_{\nu\mu}, \quad (8.21)$$

где $e_{\mu\nu\rho\sigma}$ — полностью антисимметричный тензор четвертого ранга. Выражая компоненты тензора $F_{\mu\nu}$ через компоненты векторов \mathbf{E} и \mathbf{B} , формулы (8.20) и (8.21) можно записать в виде

$$\mathbf{B}^2 - \mathbf{E}^2 = \text{inv}, \quad (8.22)$$

$$\mathbf{B}\mathbf{E} = \text{inv}. \quad (8.23)$$

Как известно, соотношения (8.22) и (8.23) можно записать как инвариантность квадрата комплексных векторов:

$$\mathbf{F}_\pm = \mathbf{B} \pm i\mathbf{E}. \quad (8.24)$$

Таким образом, собственные значения (8.9) и (8.12) являются инвариантами относительно однородных преобразований группы Лоренца.

8.2.2. Неприводимые представления однородной группы Лоренца. В гл. 3 мы показали, что инфинитезимальное преобразование однородной группы Лоренца представимо в виде

$$\Psi(x + \Delta x) = U(\varepsilon, 0) \Psi(x) = \left(1 + \frac{i}{2} \varepsilon_{\mu\nu} J_{\nu\mu}\right) \Psi(x). \quad (8.25)$$

Генератор тензорного преобразования имеет вид

$$J_{\mu\nu} = -i \left(x_\mu \frac{\partial}{\partial x_\nu} - x_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right), \quad (8.26)$$

его пространственные компоненты образуют оператор углового момента \mathbf{l} , а пространственно-временные компоненты образуют оператор \mathbf{k} :

$$J_{ij} = e_{ijk} l_k, \quad J_{4i} = i k_i. \quad (8.27)$$

Генератором спинорного представления однородной группы Лоренца является оператор

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -\frac{i}{4} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu). \quad (8.28)$$

Коммутационные соотношения операторов (8.26) и (8.28) совпадают и для компонент оператора $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ они имеют вид

$$i [J_{\mu\nu}^{(\gamma)}, J_{\rho\sigma}^{(\gamma)}] = J_{\mu\sigma}^{(\gamma)} \delta_{\nu\rho} - J_{\nu\sigma}^{(\gamma)} \delta_{\mu\rho} + J_{\nu\rho}^{(\gamma)} \delta_{\mu\sigma} - J_{\mu\rho}^{(\gamma)} \delta_{\nu\sigma}. \quad (8.29)$$

По аналогии с (8.27) выделим пространственные и пространственно-временные компоненты тензора $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$:

$$\mathbf{s} = \left(J_{23}^{(\gamma)}, J_{31}^{(\gamma)}, J_{12}^{(\gamma)} \right) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}, \quad (8.30)$$

$$i\mathbf{p} = \left(J_{41}^{(\gamma)}, J_{42}^{(\gamma)}, J_{43}^{(\gamma)} \right) = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}. \quad (8.31)$$

Коммутационные соотношения операторов \mathbf{s} и \mathbf{p} совпадают с коммутационными соотношениями операторов \mathbf{l} и \mathbf{k} и имеют следующий вид:

$$[s_i, s_j] = i e_{ijk} s_k, \quad (8.32)$$

$$[s_i, p_j] = i e_{ijk} p_k, \quad (8.33)$$

$$[p_i, p_j] = -i e_{ijk} s_k. \quad (8.34)$$

Коммутационные соотношения (8.32) показывают, что трехмерные вращения образуют подгруппу вращений группы Лоренца. Разность вращений в двух пространственных плоскостях и тех же вращений, произведенных в обратном порядке, эквивалентна вращению в третьей пространственной плоскости. Коммутационные соотношения (8.33) и (8.34) показывают, что коммутационные соотношения компонент оператора спина \mathbf{s} с компонентами оператора \mathbf{p} совпадают с коммутационными соотношениями компонент трехмерного оператора углового момента \mathbf{l} и оператора \mathbf{k} (см. (3.21), (3.22)). Коммутационные соотношения (8.34) показывают, что разность вращений в двух пространственно-временных плоскостях и тех же вращений, произве-

денных в обратном порядке, эквивалентна вращению в пространственной плоскости со знаком минус. Знак минус возникает в результате того, что определение оператора

$$\mathbf{p} = \frac{i}{2}\boldsymbol{\alpha} \quad (8.35)$$

включает мнимую единицу.

В разделе 3.2.4 мы показали, что операторы $\mathbf{l} \pm i\mathbf{k}$ осуществляют неприводимое представление однородной группы Лоренца. Поэтому по аналогии с разделом 3.2.4 введем новые операторы

$$\mathbf{a} = \frac{1}{2}(\mathbf{s} + i\mathbf{p}) = \frac{1}{4}(\boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\alpha}), \quad (8.36)$$

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2}(\mathbf{s} - i\mathbf{p}) = \frac{1}{4}(\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\alpha}). \quad (8.37)$$

Операторы \mathbf{a} и \mathbf{b} удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$[a_i, a_j] = ie_{ijk}a_k, \quad (8.38)$$

$$[b_i, b_j] = ie_{ijk}b_k, \quad (8.39)$$

$$[a_i, b_j] = 0. \quad (8.40)$$

Коммутационные соотношения (8.38)–(8.40) показывают, что операторы \mathbf{a} и \mathbf{b} осуществляют представление двух подгрупп вращений группы Лоренца, соответствующих угловым моментам двух взаимодействующих частиц. Поскольку коммутационные соотношения (8.38) и (8.39) совпадают с коммутационными соотношениями оператора углового момента, то мы можем воспользоваться аппаратом собственных функций углового момента. В частности, операторы \mathbf{a}^2 и a_3 являются коммутирующими операторами и поэтому имеют общие собственные функции ψ_{a, m_a} , удовлетворяющие уравнениям

$$\mathbf{a}^2\psi_{a, m_a} = a(a+1)\psi_{a, m_a}, \quad a_3\psi_{a, m_a} = m_a\psi_{a, m_a}, \quad (8.41)$$

где

$$m_a = -a, -a+1, \dots, +a. \quad (8.42)$$

Аналогично,

$$\mathbf{b}^2\psi_{b, m_b} = b(b+1)\psi_{b, m_b}, \quad b_3\psi_{b, m_b} = m_b\psi_{b, m_b}, \quad (8.43)$$

где

$$m_b = -b, -b+1, \dots, +b. \quad (8.44)$$

Матричные элементы операторов \mathbf{a} и \mathbf{b} для состояний (m_a, m_b) и (m'_a, m'_b) имеют стандартный вид матричных элементов оператора углового момента. Таким образом, в общем случае представление (8.36)–(8.37) задается парой чисел (a, b) и имеет размерность $(2a+1)(2b+1)$.

В частном случае углового момента $j = 1/2$ возможны лишь два типа поля: $(1/2, 0)$ и $(0, 1/2)$. Соответствующие им волновые функции являются собственными функциями оператора γ_4 :

$$\gamma_4 \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda \quad (8.45)$$

и имеют вид

$$\psi_{+1} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ I \end{pmatrix}. \quad (8.46)$$

Спиновая часть уравнения (8.1) в указанном представлении принимает вид

$$\Sigma \mathbf{B} - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E} = 2(\mathbf{aF}_+ + \mathbf{bF}_-), \quad (8.47)$$

где векторы \mathbf{F}_\pm , величина которых является инвариантом относительно преобразований вращения группы Лоренца, определены равенствами (8.24).

8.3. Действительные и мнимые углы вращения

Выше мы использовали, в основном, декартовы компоненты спинного оператора Паули

$$\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}. \quad (8.48)$$

Однако наряду с проекциями оператора $\boldsymbol{\sigma}$ на оси декартовой системы координат, часто бывает удобно использовать проекции этого векторного оператора на оси криволинейных систем координат. Связь проекций векторного оператора $\boldsymbol{\sigma}$ на оси декартовой и криволинейной систем координат определяется правилами преобразования проекций векторов. Так, например, проекции оператора $\boldsymbol{\sigma}$ на оси сферической системы координат имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_r &= \sigma_x \sin \theta \cos \varphi + \sigma_y \sin \theta \sin \varphi + \sigma_z \cos \theta = \\ &= \sigma_+ \sin \theta \exp(-i\varphi) + \sigma_- \sin \theta \exp(i\varphi) + \sigma_z \cos \theta, \\ \sigma_\theta &= \sigma_x \cos \theta \cos \varphi + \sigma_y \cos \theta \sin \varphi - \sigma_z \sin \theta = \\ &= \sigma_+ \cos \theta \exp(-i\varphi) + \sigma_- \cos \theta \exp(i\varphi) - \sigma_z \sin \theta, \\ \sigma_\varphi &= -\sigma_x \sin \varphi + \sigma_y \cos \varphi = -i\sigma_+ \exp(-i\varphi) + i\sigma_- \exp(i\varphi), \end{aligned} \quad (8.49)$$

где

$$\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y).$$

Несложно видеть, что квадраты проекций оператора $\boldsymbol{\sigma}$ на оси сферической системы координат, так же как и квадраты его проекций на оси декартовой системы координат, равны единичным операторам:

$$\sigma_r^2 = \sigma_\theta^2 = \sigma_\varphi^2 = I,$$

а коммутационные соотношения операторов (8.49) аналогичны коммутационным соотношениям проекций оператора σ на оси декартовой системы координат:

$$[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2ie_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma,$$

где $\alpha, \beta, \gamma = r, \theta, \varphi$ и $e_{\alpha\beta\gamma}$ — полностью антисимметричный единичный псевдотензор 3-го ранга, меняющий знак при нечетном числе перестановок его индексов.

Собственными функциями оператора σ_r , удовлетворяющими уравнению

$$\sigma_r w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)},$$

являются спиноры

$$\begin{aligned} w^{(\sigma=+1)}(\theta, \varphi) &= \begin{pmatrix} \exp(-i\varphi/2) \cos \theta/2 \\ \exp(i\varphi/2) \sin \theta/2 \end{pmatrix}, \\ w^{(\sigma=-1)}(\theta, \varphi) &= \begin{pmatrix} -\exp(-i\varphi/2) \sin \theta/2 \\ \exp(i\varphi/2) \cos \theta/2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.50)$$

Действуя на спиноры (8.50) операторами σ_θ и σ_φ , получаем

$$\sigma_\theta w^{(\pm)} = w^{(\mp)}, \quad \sigma_\varphi w^{(\pm)} = \pm iw^{(\mp)}. \quad (8.51)$$

Эти соотношения аналогичны преобразованиям собственных функций оператора σ_z при действии на них операторами $\sigma_{x,y}$ в декартовой системе координат.

Несложно видеть, что спиноры $w_{1,2,3,4}$, определяемые равенствами (8.17), совпадают со спинорами $w^{(\pm)}$ для мнимых углов. Выделим поэтому действительную и мнимую часть функций $\Phi(\mathbf{r})$ и $\Theta(\mathbf{r})$:

$$\Phi = \Phi' + i\Phi'', \quad \Theta = \Theta' + i\Theta''.$$

Путем несложных преобразований спиноры w_n можно привести к виду

$$\begin{aligned} w_1 &= \left(\operatorname{ch} \frac{\Phi''}{2} + \sigma_3 \operatorname{sh} \frac{\Phi''}{2} \right) \left(w'_1 \operatorname{ch} \frac{\Theta''}{2} + iw'_2 \operatorname{sh} \frac{\Theta''}{2} \right), \\ w_2 &= \left(\operatorname{ch} \frac{\Phi''}{2} + \sigma_3 \operatorname{sh} \frac{\Phi''}{2} \right) \left(w'_2 \operatorname{ch} \frac{\Theta''}{2} - iw'_1 \operatorname{sh} \frac{\Theta''}{2} \right), \\ w_3 &= \left(\operatorname{ch} \frac{\Phi''}{2} - \sigma_3 \operatorname{sh} \frac{\Phi''}{2} \right) \left(w'_1 \operatorname{ch} \frac{\Theta''}{2} - iw'_2 \operatorname{sh} \frac{\Theta''}{2} \right), \\ w_4 &= \left(\operatorname{ch} \frac{\Phi''}{2} - \sigma_3 \operatorname{sh} \frac{\Phi''}{2} \right) \left(w'_2 \operatorname{ch} \frac{\Theta''}{2} + iw'_1 \operatorname{sh} \frac{\Theta''}{2} \right), \end{aligned} \quad (8.52)$$

где

$$w'_1 = \begin{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\Phi'}{2}\right) \cos \frac{\Theta'}{2} \\ \exp\left(i\frac{\Phi'}{2}\right) \sin \frac{\Theta'}{2} \end{pmatrix}, \quad w'_2 = \begin{pmatrix} -\exp\left(-i\frac{\Phi'}{2}\right) \sin \frac{\Theta'}{2} \\ \exp\left(i\frac{\Phi'}{2}\right) \cos \frac{\Theta'}{2} \end{pmatrix}. \quad (8.53)$$

Введем в каждой точке пространства \mathbf{r} сферическую систему координат, ориентация осей которой связана с ориентацией векторов напряженности электрического и магнитного полей в данной точке пространства, т. е. положим

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_R, \sigma_{\Theta'}, \sigma_{\Phi'}),$$

где углы θ и φ сферической системы координат в данной точке пространства определены равенствами $\theta = \Theta'$ и $\varphi = \Phi'$, а комплексные углы Θ и Φ определяются соотношениями (8.15) и (8.16). Тогда спиноры $w'_{1,2}$ являются собственными функциями оператора σ_R , удовлетворяющими собственным значениям $\sigma = \pm 1$:

$$\sigma_R w^{(\sigma)}(\Theta', \Phi') = \sigma w^{(\sigma)}(\Theta', \Phi').$$

Учитывая соотношения (8.51), выражения (8.52) можно записать в виде

$$\begin{aligned} w_{1,2} &= \exp\left(\frac{\Phi''}{2}\sigma_3\right) \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\sigma_{\Phi'}\right) w^{(\pm)}(\Theta', \Phi'), \\ w_{3,4} &= \exp\left(-\frac{\Phi''}{2}\sigma_3\right) \exp\left(-\frac{\Theta''}{2}\sigma_{\Phi'}\right) w^{(\pm)}(\Theta', \Phi'). \end{aligned}$$

Окончательно для биспиноров ψ_n получаем

$$\psi_n = \exp\left(\frac{\Phi''}{2}\alpha_3\right) \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\alpha_{\Phi'}\right) \psi'_n, \quad (8.54)$$

где

$$\psi'_{1,2} = \begin{pmatrix} w^{(\pm)}(\Theta', \Phi') \\ w^{(\pm)}(\Theta', \Phi') \end{pmatrix}, \quad \psi'_{3,4} = \begin{pmatrix} w^{(\pm)}(\Theta', \Phi') \\ -w^{(\pm)}(\Theta', \Phi') \end{pmatrix}.$$

Напомним, что оператор $\exp\left(\frac{\Phi''}{2}(\mathbf{n}\boldsymbol{\alpha})\right)$ является оператором преобразования Лоренца к системе координат, движущейся в направлении вектора \mathbf{n} со скоростью $v/c = -\text{th}\frac{\Phi''}{2}$. Таким образом, формула (8.54) дает наглядную интерпретацию физического смысла состояний, определяемых биспинорными волновыми функциями (8.17)–(8.18).

8.4. Положительно и отрицательно частотные решения

Полученные явные выражения для ортогональных биспиноров, являющихся собственными функциями спиновой части уравнения (7.2), позволяют обратиться к анализу общих свойств решений этого уравнения. Запишем уравнение (7.2) в следующем виде:

$$H_0\Psi(x) = \mu_0(\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B}(x) - i\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}(x))\Psi(x), \quad (8.55)$$

где H_0 — трансляционный оператор, совпадающий по виду с оператором уравнения КГФ:

$$H_0 = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(x) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi(x) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right]. \quad (8.56)$$

Итак, общее решение уравнения (8.55) имеет вид

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^4 \psi_n(x) g_n(x), \quad (8.57)$$

где биспиноры ψ_n являются собственными функциями уравнения

$$(\Sigma \mathbf{B} - i\alpha \mathbf{E}) \psi_n = \lambda_n \psi_n, \quad (8.58)$$

а функции $g_n(x)$ являются решениями связанной системы уравнений:

$$\sum_n \bar{\psi}_m H_0 \psi_n g_n(x) = \mu_0 \sum_n \lambda_n \bar{\psi}_m \psi_n g_n(x). \quad (8.59)$$

В соответствии с приведенными выше определениями, биспиноры $\psi_n(x)$ являются функциями векторов напряженности электрического и магнитного полей, поэтому в общем случае они зависят от 4-вектора $x = (\mathbf{r}, ict)$. Следовательно, система уравнений (8.59) является в общем случае системой четырех связанных дифференциальных уравнений второго порядка по пространственным и временным производным для четырех неизвестных функций $g_n(x)$.

Как мы отмечали выше, важную роль в теории распространения волновых пакетов играет понятие дисперсионной поверхности. Дисперсионная поверхность определяет зависимость величины волнового вектора от несущей частоты для различных направлений распространения волны $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\omega)$. В частности, обратная величина производной $\partial \mathbf{k} / \partial \omega$ определяет групповую скорость распространения волнового пакета (см. (4.90)). В теории волновых процессов часто бывает удобно оперировать с эквивалентным понятием энергетической поверхности $E^{(\lambda)}(\mathbf{p})$, определяющим зависимость энергии $E^{(\lambda)} = \hbar \omega^{(\lambda)}$ от направления распространения волнового пакета и величины его импульса $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ (см. сноску в конце раздела 4.2.1). В предыдущей главе исходя из общих соображений мы показали, что каждая из гиперповерхностей положительно и отрицательно частотных состояний в случае спинорного поля будет разбиваться в общем случае на четыре подзоны. Система уравнений (8.59) наглядно демонстрирует возможность такого расщепления. Действительно, поскольку система уравнений (8.59) является системой четырех связанных уравнений, то количество листов дисперсионной поверхности для спинорной частицы становится в общем случае в четыре раза больше, чем для скалярной частицы. Проиллюстрируем сказанное на примере движения частицы в стационарных внешних полях, когда напряженности полей зависят лишь от пространственных координат $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. В этом случае

мы можем разбить пространство на участки, соответствующие почти постоянным значениям напряженности полей $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_0$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0$, тогда в пределах каждого участка система связанных уравнений (8.59) разбивается на четыре отдельных уравнения:

$$H_0(E) g_n(\mathbf{r}) = \mu_0 \lambda_n g_n(\mathbf{r}). \quad (8.60)$$

Ввиду квадратичной зависимости $H_0(E)$ каждое из четырех уравнений (8.60) имеет как положительно, так и отрицательно частотные решения $E_n^{(\pm)}(\mathbf{p})$. В свою очередь каждая из указанных положительно и отрицательно частотных зон состояний разбивается на четыре подзоны, отвечающие четырем собственным значениям λ_n , которые в общем случае различны.

Учитывая явный вид ортогональных биспиноров (8.18), несложно показать, что система уравнений (8.59) представляет собой две пары связанных уравнений. Действительно, пусть L — произвольный дифференциальный оператор, тогда, используя (8.18), получаем

$$\bar{\psi}_{\{1,2\}} L \psi_{\{1,2\}} = w_{\{1,2\}}^+ L w_{\{1,2\}} - w_{\{1,2\}}^- L w_{\{1,2\}} = 0,$$

где $\{n, m\}$ означает любое из двух значений, n или m . Аналогично, $\bar{\psi}_{\{3,4\}} L \psi_{\{3,4\}} = 0$. Следовательно, для скалярных волновых функций $g_n(x)$ получаем

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{3,4}(x) H_0 [\psi_1(x) g_1(x) + \psi_2(x) g_2(x)] &= \mu_0 \lambda_{1,2}(x) g_{1,2}(x), \\ \bar{\psi}_{1,2}(x) H_0 [\psi_3(x) g_3(x) + \psi_4(x) g_4(x)] &= \mu_0 \lambda_{3,4}(x) g_{3,4}(x). \end{aligned} \quad (8.61)$$

Таким образом, взаимно зависимыми оказываются пространственные части волновых функций при ортогональных биспинорах одинаковой четности по отношению к оператору γ_5 .

Как мы уже говорили выше, по аналогии со случаем скалярной частицы пространство состояний спинорной частицы можно разбить на две зоны состояний. Одна из них включает все положительно частотные решения $E_n^{(+)}$, а другая — все отрицательно частотные решения $E_n^{(-)}$. В случае скалярной частицы удобство такого разбиения состояло в том, что спектр отрицательно частотных решений для частицы совпадал со спектром положительно частотных решений для зарядово сопряженной частицы. Это связано с тем, что уравнение для зарядово-сопряженной скалярной частицы совпадает с комплексно сопряженным уравнением для частицы. Как мы видели в предыдущей главе, в случае спинорных полей операция зарядового сопряжения отличается от комплексного сопряжения. Уравнение для зарядово-сопряженной частицы имеет вид

$$H_C \Psi_C(x) = -\mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \Psi_C(x), \quad (8.62)$$

где

$$H_C = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(x) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i \hbar \frac{\partial}{\partial t} + q_0 \varphi(x) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right]. \quad (8.63)$$

Поскольку спиновые части уравнений (8.55) и (8.62) совпадают, то общее решение уравнения (8.62) можно записать, используя те же ортогональные биспиноры (8.58):

$$\Psi_C(x) = \sum_{n=1}^4 \psi_n(x) f_n(x), \quad (8.64)$$

тогда для волновых функций $f_n(x)$ получаем

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{3,4}(x) H_C [\psi_1(x) f_1(x) + \psi_2(x) f_2(x)] &= \mu_0 \lambda_{1,2}(x) f_{1,2}(x), \\ \bar{\psi}_{1,2}(x) H_C [\psi_3(x) f_3(x) + \psi_4(x) f_4(x)] &= \mu_0 \lambda_{3,4}(x) f_{3,4}(x). \end{aligned} \quad (8.65)$$

Поскольку $H_C^* = H_0$, то естественно перейти от уравнений (8.65) к комплексно сопряженным уравнениям. Учитывая определение (8.17) спиноров w_n , несложно показать, что имеют место следующие соотношения:

$$w_1^* = i\sigma_2 w_4, \quad w_2^* = -i\sigma_2 w_3, \quad w_3^* = i\sigma_2 w_2, \quad w_4^* = -i\sigma_2 w_1. \quad (8.66)$$

Отсюда получаем

$$\psi_1^* = \gamma_2 \psi_4, \quad \psi_2^* = -\gamma_2 \psi_3, \quad \psi_3^* = -\gamma_2 \psi_2, \quad \psi_4^* = \gamma_2 \psi_1. \quad (8.67)$$

Комплексно сопрягая первую пару уравнений (8.65) и учитывая приведенные соотношения и выражения (8.9), (8.12) для собственных значений λ_n , получаем

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2 H_0 (\psi_4 f_1^* - \psi_3 f_2^*) &= \mu_0 \lambda_4 f_1^*, \\ \bar{\psi}_1 H_0 (\psi_4 f_1^* - \psi_3 f_2^*) &= -\mu_0 \lambda_3 f_2^*. \end{aligned}$$

Сравнивая получившиеся уравнения со второй парой уравнений (8.61), мы видим, что эти две системы уравнений совпадают. Следовательно,

$$g_3(x) = -f_2^*(x), \quad g_4(x) = f_1^*(x). \quad (8.68)$$

Аналогично, из второй пары уравнений (8.65) получаем

$$g_1(x) = f_4^*(x), \quad g_2(x) = -f_3^*(x). \quad (8.69)$$

Подставляя (8.67)–(8.69) в (8.64), получаем

$$\Psi_C^*(x) = \left(\sum_{n=1}^4 \psi_n(x) f_n(x) \right)^* = \gamma_2 \sum_{n=1}^4 \psi_n(x) g_n(x) = \gamma_2 \Psi(x). \quad (8.70)$$

Как видно, соотношение (8.70), которое было получено на основе свойств ортогональных биспиноров, показывает, что матрицей преобразования зарядового сопряжения является матрица γ_2 , совпадающая с матрицей $U_C^{(1)}$, полученной в гл. 7.

Отметим специфику соотношения (8.70) по сравнению с аналогичным соотношением теории скалярных частиц. Отрицательно частотные решения уравнения КГФ соответствуют «зеркальной частице», заряд

которой противоположен заряду «частицы». В свою очередь отрицательно частотные решения, определяемые соотношением (8.70), соответствуют «зеркальной античастице». Действительно, из (8.70) получаем

$$\bar{\Psi}_C(x)\Psi_C(x) = -\bar{\Psi}(x)\Psi(x).$$

Таким образом, одновременное изменение частотности решения и знака нормы волновой функции приводит к тому, что соотношение (8.70) связывает волновые функции решений, отвечающих одному и тому же знаку плотности заряда.

При выводе соотношения (8.70) мы использовали явный вид ортогональных биспиноров (8.18). Однако в предыдущей главе исходя из общих соотношений мы показали, что операция зарядового сопряжения осуществляется двумя матрицами: $U_C^{(1)} = \gamma_2$ и $U_C^{(2)} = \gamma_5 U_C^{(1)}$. Учитывая общие свойства уравнения (7.2), можно, не проводя повторного рассмотрения, показать, что второе решение также согласуется с явным видом ортогональных биспиноров. Однако преобразование с матрицей $U_C^{(2)}$ не меняет знака нормы волновой функции, поэтому отрицательно частотные решения для частицы будут связываться с положительно частотными решениями для частицы противоположного заряда. Следовательно, спинорная «зеркальная частица» может быть как зеркальной частицей, так и зеркальной античастицей.

8.5. Спинорное представление

В спинорном представлении матрицы γ_μ имеют вид

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -i\boldsymbol{\sigma} \\ i\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = - \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.71)$$

Матрицы (8.71) по-прежнему удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}.$$

Матрица γ_5 в спинорном представлении принимает вид

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (8.72)$$

Поскольку пространственные компоненты матриц (8.71) совпадают с пространственными компонентами матриц γ_μ в стандартном представлении, то оператор спина $\boldsymbol{\Sigma}$ одинаков в стандартном и спинорном представлениях. Матрица $\boldsymbol{\alpha}$ в спинорном представлении принимает вид

$$\boldsymbol{\alpha} = i\gamma_4 \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (8.73)$$

В результате уравнение (8.3) на собственные значения для спиновой части оператора уравнения (7.2) принимает в спинорном представлении вид

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{B} - i\mathbf{E}) \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & (\mathbf{B} + i\mathbf{E}) \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \psi_n = \lambda_n \psi_n. \quad (8.74)$$

Таким образом, как мы отмечали в разделе 8.2, операторы $(\boldsymbol{\Sigma} \pm \boldsymbol{\alpha})/2$ осуществляют представление двух подгрупп вращений группы преобразований Лоренца. Верхний и нижний спиноры биспинорной волновой функции

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$$

являются решениями двух независимых спинорных уравнений:

$$(\mathbf{B} - i\mathbf{E}) \boldsymbol{\sigma} \xi_n = \lambda_n \xi_n, \quad (\mathbf{B} + i\mathbf{E}) \boldsymbol{\sigma} \eta_n = \lambda_n \eta_n. \quad (8.75)$$

Несложно видеть, что уравнения (8.75) совпадают с уравнениями (8.8), поэтому собственные значения по-прежнему имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{(\mathbf{B} - i\mathbf{E})^2}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{(\mathbf{B} + i\mathbf{E})^2}.$$

Отвечающие этим собственным значениям биспинорные собственные волновые функции уравнения (8.74) имеют теперь вид

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} w_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} w_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ w_3 \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ w_4 \end{pmatrix}, \quad (8.76)$$

где спиноры w_i определяются выражениями (8.17).

Свойства биспиноров (8.76) во многом совпадают со свойствами аналогичных биспиноров (8.18) в стандартном представлении. Действительно, биспиноры (8.76) также являются одновременно и собственными функциями оператора γ_5 , имеющего теперь вид (8.72):

$$\gamma_5 \psi_{1,2} = \psi_{1,2}, \quad \gamma_5 \psi_{3,4} = -\psi_{3,4}.$$

Правила ортогональности биспиноров (8.76) определяются общей формулой (8.5):

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_n \psi_n &= 0, & \bar{\psi}_1 \psi_2 &= 0, & \bar{\psi}_1 \psi_3 &= 1, \\ \bar{\psi}_1 \psi_4 &= 0, & \bar{\psi}_2 \psi_3 &= 0, & \bar{\psi}_2 \psi_4 &= 1, & \bar{\psi}_3 \psi_4 &= 0. \end{aligned}$$

Так же как и в стандартном представлении, получаем

$$\bar{\psi}_n \boldsymbol{\Sigma} \psi_n = 0, \quad \bar{\psi}_n \boldsymbol{\alpha} \psi_n = 0.$$

Отличие состоит лишь в том, что в стандартном представлении при движении частицы в магнитном поле ($\mathbf{E} = 0$), как мы увидим позже, уравнения для верхнего и нижнего спинора биспинорной волновой функции можно разделить. В таких состояниях $\bar{\psi} \boldsymbol{\Sigma} \psi \neq 0$, а $\bar{\psi} \boldsymbol{\alpha} \psi = 0$. В спинорном представлении такое разделение невозможно, поскольку матрица γ_4 в этом случае антидиагональна, а обе матрицы, $\boldsymbol{\Sigma}$ и $\boldsymbol{\alpha}$, являются диагональными. Хотя, конечно же, состояния, в которых $\bar{\psi} \boldsymbol{\Sigma} \psi \neq 0$ и $\bar{\psi} \boldsymbol{\alpha} \psi = 0$, по-прежнему возможны. Вопрос состоит лишь в том, какие биспиноры удобнее использовать в качестве базисных: являющиеся собственными функциями оператора γ_5 в стандартном

представлении или в спинорном? В обоих случаях волновые функции частиц или античастиц, т. е. волновые функции с ненулевой нормой, являются суперпозицией базисных биспиноров.

8.6. Квартионы

Итак, приведенный выше анализ показал, что общее решение уравнения (7.2) может быть представлено в виде разложения по биспинорам, являющимся собственными решениями спиновой части уравнения (7.2):

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n(x) g_n(x), \quad (8.77)$$

где C_n — константы, вид ортогональных биспиноров $\psi_n(x)$ определяется выражениями (8.17)–(8.18), а уравнения для скалярных волновых функций $g_n(x)$ имеют вид (8.61). Уравнения для скалярных функций $g_n(x)$ являются уравнениями второго порядка по временной производной, поэтому выражение (8.77) содержит как положительно, так и отрицательно частотные решения. Отрицательно частотные решения, исходя из аналогии со случаем скалярной частицы, мы связали с зеркальными частицами, и в следующей главе будет показано, что эта аналогия обусловлена общностью математической базы. Следовательно, состояния, отвечающие четырем положительно частотным решениям (8.77), выступают в качестве четырех элементарных возбуждений спинорного материального поля, суперпозиция которых образует те или иные состояния частиц или античастиц. Это свидетельствует о том, что состояния спинорных частиц являются составными, а состояния, описываемые биспинорами ψ_n , являются базовыми структурными элементами. Естественным поэтому выглядит желание идентифицировать эти состояния определенным термином, поскольку при анализе задач взаимодействия спинорного поля с электромагнитным полем мы будем постоянно обращаться к общему виду решения (8.77). В качестве такого термина можно выбрать термин *квартионы*, поскольку как положительно частотные, так и отрицательно частотные решения (8.77) содержат квартет таких состояний.¹⁾

8.6.1. Нейтральные (безмассовые) квартаоны. Как следует из вышеприведенных формул, общее положительно частотное решение задачи о движении частицы в однородном магнитном или электрическом поле имеет вид

¹⁾ Поскольку термин *квартион* созвучен уже известному термину *квартернион*, то сразу отметим, что эти два термина относятся к различным математическим множествам, алгебра которых существенно различается. Например, представлением алгебры кватернионов являются операторы группы $SU(2)$ -симметрии, т. е. спиновые матрицы Паули.

$$\Psi(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[C_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} g_1(z) + C_2 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix} g_2(z) + C_3 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix} g_3(z) + C_4 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix} g_4(z) \right], \quad (8.78)$$

где спиноры $w^{(\sigma)}$ являются собственными решениями уравнения $\sigma_z w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}$, а ось z совпадает с направлением вектора напряженности магнитного или электрического поля. Учитывая симметричные свойства собственных значений λ_n , определяемых формулами (8.9) и (8.12), в случае магнитного поля получаем

$$\Psi_m(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[C_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} + C_3 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix} \right] g_1(z) + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[C_2 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix} + C_4 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix} \right] g_2(z), \quad (8.79)$$

а в случае электрического поля

$$\Psi_e(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[C_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} + C_4 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix} \right] g_1(z) + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[C_2 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix} + C_3 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix} \right] g_2(z). \quad (8.80)$$

Отметим следующие свойства ортогональных биспиноров:

$$\Sigma_z \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \Sigma_z \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (8.81)$$

$$\Sigma_z \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \quad \Sigma_z \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix},$$

$$\alpha_z \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \alpha_z \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (8.82)$$

$$\alpha_z \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \quad \alpha_z \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix}.$$

Различие в виде пространственных волновых функций означает различие в дисперсионных свойствах распространения частицы. Как следует из формул (8.79)–(8.82), при распространении частицы в области ненулевого магнитного поля различными дисперсионными свойствами обладают состояния, отвечающие различным значениям проекции спина на направление магнитного поля, и дисперсионные свойства не зависят от собственных значений оператора α_z . В свою очередь при движении частицы в области ненулевого электрического поля различными дисперсионными свойствами обладают состояния, отвечающие различным собственным значениям оператора α_z , и эти свойства не зависят от значения проекции спина на направление электрического поля. Указанные свойства дают математические основания введения

определений векторов электрической (7.21) и магнитной (7.22) поляризации, которые ранее были введены лишь на основе аналогии с уравнениями классической электродинамики.

Биспиноры $\underline{\psi}_n$ отвечают безмассовым состояниям спинорного поля, поскольку $\underline{\psi}_n \psi_n = 0$, т.е. каждое из состояний по отдельности не образует состояния материального поля, характеризующегося конечной массой, энергией или другими характеристиками, поскольку $\underline{\psi}_n \Sigma \psi_n = 0$ и $\underline{\psi}_n \alpha \psi_n = 0$. Следовательно, состояния материального поля, обладающие конечной энергией, заведомо являются суперпозицией нейтральных квартаионов.¹⁾

8.6.2. Положительный и отрицательный квартаионы. Из формулы (8.79) наглядно видно, что в случае когда частица взаимодействует только с магнитным полем, возникают естественные суперпозиции безмассовых квартаионов:

$$\frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix}.$$

Действительно, вводя в общем решении (8.77) новые константы, определяемые соотношениями

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_1 + B_1), & C_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_2 + B_2), \\ C_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_1 - B_1), & C_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_2 - B_2), \end{aligned} \quad (8.83)$$

из (8.79) получаем

$$\begin{aligned} \Psi_m(z) &= A_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} g_1(z) + A_2 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix} g_2(z) + \\ &+ B_1 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix} g_1(z) + B_2 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(-)} \end{pmatrix} g_2(z). \end{aligned} \quad (8.84)$$

Как видно, анализ задач о движении частицы в магнитном поле можно проводить, используя в качестве базиса разложения четыре новых квартаиона:

$$\psi_\sigma^{(+)} = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_\sigma^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(\sigma)} \end{pmatrix}. \quad (8.85)$$

В то время как квартаионы ψ_n в формуле (8.78) являются собственными функциями операторов $(\mathbf{n}_B \Sigma)$ и γ_5 , положительные и отрицательные квартаионы (8.85) являются собственными функциями операторов $(\mathbf{n}_B \Sigma)$ и γ_4 . Действительно,

$$\gamma_4 \psi_\sigma^{(+)} = \psi_\sigma^{(+)}, \quad \gamma_4 \psi_\sigma^{(-)} = -\psi_\sigma^{(-)}.$$

¹⁾ Однако это не означает, что нейтральный квартаион, взаимодействуя с внешним электромагнитным полем, не может распасться на состояния, обладающие конечной массой (см. гл. 11).

Естественно поэтому, что свойства ортогональности квартаионов (8.85) отличаются от свойств ортогональности нейтральных квартаионов и имеют вид

$$\overline{\psi}_\sigma^{(\lambda)} \psi_{\sigma'}^{(\lambda')} = \lambda \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (8.86)$$

Положительные квартаионы $\psi_\sigma^{(+)}$ имеют положительную норму,

$$\overline{\psi}_\sigma^{(+)} \psi_\sigma^{(+)} = 1,$$

а норма отрицательных квартаионов отрицательна:

$$\overline{\psi}_\sigma^{(-)} \psi_\sigma^{(-)} = -1.$$

Поэтому если состояния с положительной нормой связать с состояниями частицы, а состояния с отрицательной нормой — с состояниями античастицы, то волновая функция (8.84) отвечает состоянию частицы, когда $|A_1|^2 + |A_2|^2 > |B_1|^2 + |B_2|^2$. Оператор γ_5 переводит положительные квартаионные состояния в отрицательные, не меняя значения квантового числа σ , и вместе с тем коммутирует с оператором уравнения (7.2), поэтому при анализе задач взаимодействия спинорного материального поля с магнитным полем, как следует из (8.84), мы можем ограничиться рассмотрением лишь положительных квартаионных состояний:

$$\Psi_m(z) = \begin{bmatrix} \left(w^{(+)} A_1 g_1(z) + w^{(-)} A_2 g_2(z) \right) \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Как видно, изменение состояния частицы по отношению к величине вектора магнитной поляризации связано с различием дисперсионных свойств квартаионов, отвечающих двум разным собственным состояниям оператора Σ_z .

В случае взаимодействия частицы с однородным электрическим полем волновая функция (8.80) с использованием преобразования коэффициентов (8.83) принимает вид

$$\begin{aligned} \Psi_e(z) = & \frac{A_1}{2} \begin{pmatrix} w^{(+)} (g_1(z) + g_2(z)) \\ w^{(+)} (g_1(z) - g_2(z)) \end{pmatrix} + \frac{B_1}{2} \begin{pmatrix} w^{(+)} (g_1(z) - g_2(z)) \\ w^{(+)} (g_1(z) + g_2(z)) \end{pmatrix} + \\ & + \frac{A_2}{2} \begin{pmatrix} w^{(-)} (g_1(z) + g_2(z)) \\ -w^{(-)} (g_1(z) - g_2(z)) \end{pmatrix} + \frac{B_2}{2} \begin{pmatrix} -w^{(-)} (g_1(z) - g_2(z)) \\ w^{(-)} (g_1(z) + g_2(z)) \end{pmatrix}. \quad (8.87) \end{aligned}$$

Как видно, биспиноры при коэффициентах B_i получаются как результат действия оператора $-\gamma_5$ на биспиноры при коэффициентах A_i . Следовательно, при анализе задач о движении частиц в электрическом поле мы можем также ограничиться лишь рассмотрением решений, отвечающих положительной норме волновых функций. Норма волновых функций при коэффициентах A_i равна

$$N_A(z) = \frac{1}{2} (g_1^*(z) g_2(z) + g_1(z) g_2^*(z)),$$

а норма волновых функций при коэффициентах B_i в каждой точке пространства имеет противоположное значение: $N_B(z) = -N_A(z)$.

Вместе с тем, как следует из (8.87), если начальное состояние частицы представляло собой волновой пакет, составленный из положительных квартаионов, то по мере его распространения в пространстве неоднородном электрическом поле состояние частицы становится суперпозицией положительных и отрицательных квартаионов. Например, в случае когда $U(z)|_{z \rightarrow -\infty} = 0$, пространственные волновые функции падающей частицы имеют вид: $g_{1,2}(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \exp(ikz)$ и биспиноры при коэффициентах $A_{1,2}$ принимают вид положительных квартаионов. Однако ввиду различия дисперсионных свойств состояний, отвечающих двум различным собственным значениям оператора α_z , амплитуда отрицательных квартаионных состояний волновых функций при коэффициентах $A_{1,2}$ становится отличной от нуля.

8.6.3. Магнитное поле. Определим характеристики внутренних степеней свободы частицы, находящейся в различных квартаионных состояниях.

В случае когда частица взаимодействует лишь со стационарным магнитным полем (т. е. $\mathbf{E} = 0$), собственные значения становятся вырожденными:

$$\lambda_{1,2} = \pm B(\mathbf{r}), \quad \lambda_{3,4} = \lambda_{1,2}. \quad (8.88)$$

Из (8.15) и (8.16) получаем

$$\begin{aligned} \cos \Theta(\mathbf{r}) &= \frac{B_z(\mathbf{r})}{B(\mathbf{r})} = \cos \theta(\mathbf{r}), \\ \cos \Phi(\mathbf{r}) &= \frac{B_x(\mathbf{r})}{B(\mathbf{r}) \sin \theta(\mathbf{r})} = \cos \varphi(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (8.89)$$

где $\theta(\mathbf{r})$ и $\varphi(\mathbf{r})$ — полярный и азимутальный углы вектора $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ в точке \mathbf{r} . Подставляя выражения (8.89) в формулы (8.17), получаем

$$w_1 = w_3 = w^{(+)}(\theta(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})), \quad w_2 = w_4 = w^{(-)}(\theta(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})), \quad (8.90)$$

где спиноры $w^{(\pm)}$ определяются формулами (8.50).

Таким образом, в произвольном магнитном поле, а не только в однородном, в качестве базовых состояний частицы можно выбрать положительные и отрицательные квартаионные состояния:

$$\psi_\sigma^{(+)} = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)}(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_\sigma^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(\sigma)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (8.91)$$

Спин частицы в квартаионных состояниях (8.91) определяется следующими выражениями:

$$\overline{\psi}_\sigma^{(+)} \boldsymbol{\Sigma} \psi_\sigma^{(+)} = w^{(\sigma)+} \boldsymbol{\sigma} w^{(\sigma)}, \quad \overline{\psi}_\sigma^{(-)} \boldsymbol{\Sigma} \psi_\sigma^{(-)} = -w^{(\sigma)+} \boldsymbol{\sigma} w^{(\sigma)}.$$

Таким образом, спин частицы, находящейся в положительном квартаионном состоянии $\psi_\sigma^{(+)}$, совпадает по величине и противоположен

по направлению спину частицы, находящейся в quartiонном состоянии $\psi_{\sigma}^{(-)}$. Вектор магнитной поляризации определяется равенством (7.22). Для него получаем

$$\mathbf{M}_{\sigma}^{(+)} = \mu_0 \bar{\psi}_{\sigma}^{(+)} \boldsymbol{\Sigma} \psi_{\sigma}^{(+)} = \sigma \mu_0 \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r})}{B(\mathbf{r})}, \quad \mathbf{M}_{\sigma}^{(-)} = \mu_0 \psi_{\sigma}^{(-)} \boldsymbol{\Sigma} \psi_{\sigma}^{(-)} = -\sigma \mu_0 \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r})}{B(\mathbf{r})}.$$

Следовательно, магнитные моменты частиц, находящихся в положительном и отрицательном quartiонных состояниях с одинаковым значением σ , направлены противоположно друг другу и, соответственно, параллельны или антипараллельны направлению вектора напряженности магнитного поля в данной точке пространства. При $\mu_0 > 0$ магнитный момент частицы, находящейся в состоянии $\psi_{\sigma=+1}^{(+)}$, ориентируется вдоль направления магнитного поля, а магнитный момент частицы, находящейся в состоянии $\psi_{\sigma=+1}^{(-)}$, — против направления магнитного поля. Как мы отмечали выше, это связано с тем, что положительное quartiонное состояние отвечает состоянию частицы, а отрицательное quartiонное состояние — состоянию античастицы. В терминах традиционных теорий, полагающих, что вероятность всегда является положительной, это эквивалентно тому, что магнетоны частицы μ_p и античастицы μ_a одинаковы по величине и противоположны по знаку: $\mu_p = \mu_0$ и $\mu_a = -\mu_0$.

Вектор электрической поляризации определяется выражением (7.21). Для него получаем

$$\mathbf{P}_n = -i\mu_0 \bar{\psi}_n \boldsymbol{\alpha} \psi_n = 0.$$

Таким образом, при движении в магнитном поле вектор электрической поляризации равен нулю, если материальное поле находится в суперпозиции только положительных $\sum_{\sigma} A_{\sigma} \psi_{\sigma}^{(+)}$ или только отрицательных $\sum_{\sigma} B_{\sigma} \psi_{\sigma}^{(-)}$ quartiонных состояний. Вектор электрической поляризации рассеянных частиц может быть отличен от нуля только в том случае, когда волновая функция падающей частицы (т.е. частицы, находящейся в области нулевого магнитного поля) является суперпозицией положительных и отрицательных quartiонных состояний. Следовательно, взаимодействие с магнитным полем не приводит к индуцированию вектора электрической поляризации состояния рассеянных частиц.

8.6.4. Электрическое поле. В случае когда $\mathbf{B} = 0$, собственные значения имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \mp iE(\mathbf{r}), \quad \lambda_{3,4} = \pm iE(\mathbf{r}). \quad (8.92)$$

Из (8.15) и (8.16) получаем

$$\cos \Theta(\mathbf{r}) = \frac{E_z(\mathbf{r})}{E(\mathbf{r})} = \cos \theta(\mathbf{r}), \quad \cos \Phi(\mathbf{r}) = \frac{E_x(\mathbf{r})}{E(\mathbf{r}) \sin \theta(\mathbf{r})} = \cos \varphi(\mathbf{r}),$$

Таким образом, спиноры w_n снова имеют вид (8.90), где, однако, $\theta(\mathbf{r})$ и $\varphi(\mathbf{r})$ являются теперь полярным и азимутальным углами вектора $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ в точке \mathbf{r} . Ортогональные биспиноры (8.18) принимают в этом случае вид

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (8.93)$$

Несложно видеть, что

$$\bar{\psi}_n \Sigma \psi_n = 0, \quad \bar{\psi}_n \boldsymbol{\alpha} \psi_n = 0.$$

Это обусловлено тем, что квартаины (8.93) отвечают безмассовым возбуждениям спинорного поля. Состояниям конечной массы отвечают суперпозиции биспиноров (8.93). При анализе задач рассеяния в качестве указанных суперпозиций, учитывая свойства симметрии собственных значений (8.92), удобно выбрать следующие (ср. (8.87)):

$$\begin{aligned}\Psi_\sigma^{(+)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} w^{(\sigma)}(\mathbf{r})(g_1(\mathbf{r}) + g_2(\mathbf{r})) \\ \sigma w^{(\sigma)}(\mathbf{r})(g_1(\mathbf{r}) - g_2(\mathbf{r})) \end{pmatrix}, \\ \Psi_\sigma^{(-)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma w^{(\sigma)}(\mathbf{r})(g_1(\mathbf{r}) - g_2(\mathbf{r})) \\ w^{(\sigma)}(\mathbf{r})(g_1(\mathbf{r}) + g_2(\mathbf{r})) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (8.94)$$

Биспиноры (8.94) не являются ортогональными, что говорит о том, что положительные и отрицательные квартаины взаимодействуют посредством электрического поля, а удобство их выбора связано со следующим обстоятельством. Асимптотическое выражение координатных волновых функций $g_n(\mathbf{r})$ в задачах рассеяния частицы статическим электрическим полем, имеющим ненулевые значения в конечной пространственной области, зависит от углов рассеяния (θ_s, φ_s) и имеет вид

$$g_n(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty} = \exp(i\kappa z) + \frac{G_n(\theta_s, \varphi_s)}{r} \exp(i\kappa r).$$

Следовательно, решения $\Psi_\sigma^{(+)}$ соответствуют налетающей частице, находящейся в положительном квартаинном состоянии:

$$\Psi_\sigma^{(+)} = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)}(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z),$$

а решения $\Psi_\sigma^{(-)}$ соответствуют налетающей частице, находящейся в отрицательном квартаинном состоянии:

$$\Psi_\sigma^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(\sigma)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \exp(i\kappa z).$$

Полагая, что налетающая частица приходит из области $z \rightarrow -\infty$, для налетающей частицы получаем

$$\mathbf{P}_\sigma^{(\pm)}|_{z \rightarrow -\infty} = 0, \quad \mathbf{M}_\sigma^{(\pm)}|_{z \rightarrow -\infty} = \\ = \pm \mu_0 w^{(\sigma)+}(\varphi = 0, \theta = 0) \boldsymbol{\sigma} w^{(\sigma)}(\varphi = 0, \theta = 0) = \pm \sigma \mu_0 \mathbf{e}_z,$$

где мы учли, что напряженность электрического поля, создаваемого ансамблем заряженных частиц, заключенных в конечной пространственной области, при $z \rightarrow -\infty$ имеет вид

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})|_{z \rightarrow -\infty} = -\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} \approx -\mathbf{e}_z \frac{\partial \varphi}{\partial z}.$$

В свою очередь векторы электрической и магнитной поляризации частицы в области ее взаимодействия с электрическим полем имеют вид

$$\mathbf{P}_\sigma^{(\pm)} = -i\mu_0 \overline{\Psi}_\sigma^{(\pm)} \boldsymbol{\alpha} \Psi_\sigma^{(\pm)} = \\ = \mp i\mu_0 \sigma w^{(\sigma)+} \boldsymbol{\sigma} w^{(\sigma)} \frac{g_1 g_2^* - g_1^* g_2}{2} = \pm \mu_0 \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r})}{E(\mathbf{r})} \text{Im}(g_1 g_2^*), \\ \mathbf{M}_\sigma^{(\pm)} = \mu_0 \overline{\Psi}_\sigma^{(\pm)} \boldsymbol{\Sigma} \Psi_\sigma^{(\pm)} = \\ = \pm \mu_0 w^{(\sigma)+} \boldsymbol{\sigma} w^{(\sigma)} \frac{g_3^* g_1 + g_1^* g_3}{2} = \pm \mu_0 \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r})}{E(\mathbf{r})} \text{Re}(g_1 g_2^*). \quad (8.95)$$

Из полученных формул видно, что волновые функции $\Psi_\sigma^{(+)}(\mathbf{r})$ отвечают состояниям частицы, в которых вектор электрической поляризации в каждой точке пространства параллелен ($\sigma = +1$) или антипараллелен ($\sigma = -1$) направлению вектора напряженности электрического поля в данной точке пространства соответственно. Векторы электрической поляризации античастицы в состояниях $\Psi_\sigma^{(-)}$ равны по величине и противоположны по направлению векторам электрической поляризации частицы в состояниях $\Psi_\sigma^{(+)}$ соответственно. Таким образом, взаимодействие частицы с электрическим полем приводит к индуцированию ненулевого значения вектора электрической поляризации, что обусловлено различием дисперсионных свойств решений, отвечающих различным собственным значениям оператора α_z . Действительно, для свободной частицы $g_{1,2}(z) = \exp(ikz)$ и $\text{Im}(g_1 g_2^*) = 0$.

В состояниях $\Psi_\sigma^{(\pm)}$ частица имеет также ненулевые значения вектора магнитной поляризации. Из (8.95) также следует, что вектор магнитной поляризации в каждой точке пространства параллелен вектору электрической поляризации. Это и неудивительно, поскольку оператор $\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{E}$ коммутирует с оператором $\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}$.

8.6.5. Квазиоднородные поля. Рассмотрим случай, когда векторы напряженности электрического и магнитного полей имеют постоянное направление во всех точках пространства, однако величина напряженности полей меняется:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 F_E(\mathbf{r}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_0 F_B(\mathbf{r}), \quad (8.96)$$

где $F_{E,B}$ — функции, описывающие профиль амплитуды поля. Выберем систему координат с осью y , перпендикулярной плоскости векторов $(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)$, тогда $\Phi = 0$ и из (8.54) получаем

$$\begin{aligned}\psi_{1,2} &= \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\alpha_y\right)\begin{pmatrix} w^{(\pm)}(\Theta') \\ w^{(\pm)}(\Theta') \end{pmatrix}, \\ \psi_{3,4} &= \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\alpha_y\right)\begin{pmatrix} w^{(\pm)}(\Theta') \\ -w^{(\pm)}(\Theta') \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (8.97)$$

где

$$\cos \Theta = \frac{B \cos \theta_B - iE \cos \theta_E}{\Gamma}$$

и

$$\Gamma = \sqrt{B^2 - E^2 - i2BE \cos(\theta_B - \theta_E)}.$$

Формулы существенно упрощаются, когда профили амплитуд полей совпадают,

$$F_B(\mathbf{r}) = F_E(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}).$$

Действительно, в этом случае биспиноры ψ_n не зависят от координат и система уравнений (8.59) принимает вид

$$\begin{aligned}\left[\Delta + \kappa^2 - \frac{2}{\hbar^2 c^2}(EU(\mathbf{r}) - cq_0 \mathbf{A}(\mathbf{r}) \mathbf{p}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{\hbar^2 c^2}(U^2(\mathbf{r}) - q_0^2 \mathbf{A}^2(\mathbf{r})) + \frac{2m_0 \mu_0}{\hbar^2} \lambda_n F(\mathbf{r})\right] g_n(\mathbf{r}) = 0,\end{aligned}\quad (8.98)$$

где собственные значения λ_n зависят теперь лишь от амплитуд полей:

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{B_0^2 - E_0^2 - i2\mathbf{B}_0 \mathbf{E}_0}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{B_0^2 - E_0^2 + i2\mathbf{B}_0 \mathbf{E}_0}.\quad (8.99)$$

Уравнения (8.98) и (8.99) позволяют сделать ряд общих выводов о влиянии спиновой степени свободы частиц с полуцелым спином на их движение в электрических и магнитных полях. Наиболее наглядно это может быть продемонстрировано на примере нейтральной частицы, поскольку различие дисперсионных свойств безмассовых квартионных состояний полностью определяется движением по внутренним степеням свободы. В области, где $F(\mathbf{r}) = 1$, решение уравнения (8.98) для нейтральной частицы имеет вид

$$g_n(z) = A_n \exp(ik_n z) + B_n \exp(-ik_n z),\quad (8.100)$$

где A_n и B_n — константы и $k_n = \sqrt{\kappa^2 + \frac{2m_0 \mu_0}{\hbar^2} \lambda_n}$. Поскольку $\lambda_{1,2}$

комплексно сопряжены с $\lambda_{3,4}$, то $\text{Re}(k_{1,2}) = \text{Re}(k_{3,4})$, следовательно, фазовые скорости распространения квартионов ψ_1 и ψ_3 одинаковы. Фазовые скорости квартионов $\psi_{1,3}$ и $\psi_{2,4}$ различны, поэтому спин

частицы, находящейся в суперпозиционном состоянии $\Psi = \sum_{n=1}^4 \psi_n g_n$,

прецессирует на пространственной частоте $\nu = \text{Re}(k_1) - \text{Re}(k_2)$ по мере ее распространения в области, занятой полем. При $\mathbf{B}_0 \mathbf{E}_0 > 0$ получаем: $\text{Im}(k_{1,4}) < 0$ и $\text{Im}(k_{2,3}) > 0$. Следовательно, если электрическое и магнитное поля занимают полупространство, то условиям конечности волновой функции на бесконечности удовлетворяют функции (8.100) с $A_{1,4} = 0$ и $B_{2,3} = 0$. Таким образом, отраженная волна является суперпозицией квартионов ψ_1 и ψ_4 , а прошедшая — суперпозицией квартионов ψ_2 и ψ_3 . Учитывая вышесказанное, несложно догадаться (и это мы подробнее обсудим в следующей главе), что коэффициент отражения нейтрона от полубесконечной области с ненулевым электрическим полем тождественно равен единице при любом профиле электрического поля. Исключение составляет случай, когда электрическое и магнитное поля взаимно перпендикулярны.

Действительно, при $\mathbf{B}_0 \perp \mathbf{E}_0$ собственные значения (8.99) становятся вырожденными и действительными при $B_0 > E_0$ или чисто мнимыми при $B_0 < E_0$. Выбирая ось z вдоль направления магнитного поля, при $B_0 > E_0$ получаем: $\cos \Theta = B_0 / \sqrt{B_0^2 - E_0^2}$. Волновые векторы k_n в этом случае принимают вид

$$k_{1,3} = \sqrt{\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} + \frac{2m_0 \mu_0}{\hbar^2} \sqrt{B_0^2 - E_0^2}},$$

$$k_{2,4} = \sqrt{\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} - \frac{2m_0 \mu_0}{\hbar^2} \sqrt{B_0^2 - E_0^2}}.$$

Таким образом, в случае $B_0 > E_0$ волновые векторы являются чисто действительными только при энергии налетающей частицы $\Delta E = E - m_0 c^2$, большей пороговой $\Delta E_{th} = |\mu_0| \sqrt{B_0^2 - E_0^2}$. При энергии налетающей частицы, меньшей пороговой, $\text{Re}(k_{2,4}) = 0$ и наблюдается сильное отражение.

Во всех остальных случаях волновой вектор в (8.100) является комплексным и, следовательно, нейтральная частица будет полностью отражаться от полупространства, занятого ненулевым электрическим полем. Таким образом, нейтральная частица может неограниченно глубоко проникать в область ненулевого электрического поля, занимающего полупространство, лишь в случае, когда наряду с электрическим полем в этой области полупространства имеется перпендикулярное ему магнитное поле с амплитудой, превышающей амплитуду электрического поля в каждой точке пространства.

8.6.6. Общие квартионные состояния. Как мы уже отмечали выше, при анализе задач рассеяния удобно полагать, что падающая частица приходит из области нулевых значений потенциала поля, например из области $A_\mu(x)|_{z \rightarrow -\infty} = 0$. В этом случае асимптотическое поведение пространственных волновых функций в одномерных задачах

рассеяния имеет вид: $g_n(z) = \exp(i\kappa z)$, где κ — величина волнового вектора свободной частицы, определяющаяся выражением

$$\kappa = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}.$$

Учитывая асимптотический вид волновых функций $g_n(z)$, состояние падающей частицы всегда может быть представлено в виде

$$\Psi_0(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n \exp(-i\kappa z).$$

Вид ортогональных биспиноров ψ_n определяется формулами (8.18):

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_1 \end{pmatrix}, & \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_2 \\ w_2 \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_3 \\ -w_3 \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_4 \\ -w_4 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где в общем случае, согласно формулам (8.17), все спиноры w_n различны. Однако, как было показано выше, при взаимодействии частицы только с магнитным или только с электрическим полем спиноры w_n обладают следующими свойствами (см. (8.90)):

$$w_1 = w_3 = w^{(+)}(\theta(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})), \quad w_2 = w_4 = w^{(-)}(\theta(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})),$$

где углы $\theta(\mathbf{r})$ и $\varphi(\mathbf{r})$ определяют направление векторов напряженности магнитного или электрического полей в точке \mathbf{r} . Благодаря этому свойству состояние налетающей частицы в одномерных задачах рассеяния может быть представлено в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Psi_0(z) &= \left[\frac{C_1 + C_3}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{C_1 - C_3}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix} + \frac{C_2 + C_4}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{C_2 - C_4}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(-)} \end{pmatrix} \right] \exp(i\kappa z), \end{aligned}$$

т. е. состояние налетающей частицы становится суперпозицией четырех квартионных состояний (8.91):

$$\psi_{\sigma}^{(+)} = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{\sigma}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(\sigma)} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, в случае взаимодействия частицы только с магнитным или только с электрическим полем состояние материального поля в любой точке пространства может быть представлено в виде суперпозиции четырех квартионов.

При взаимодействии частицы с суперпозицией магнитного и электрического полей все спиноры w_n различны во всех случаях, кроме

одного, когда $\mathbf{E}(\mathbf{r}) \parallel \mathbf{B}(\mathbf{r})$. В остальных случаях углы $\Theta(\mathbf{r})$ и $\Phi(\mathbf{r})$, определяемые равенствами (8.15)–(8.16), являются комплексными и соотношения (8.90) не выполняются. Встает вопрос: возможно ли в общем случае выделение четырех quartiонных состояний со свойствами, аналогичными свойствам quartiонов (8.91)? По сути дела, ответ на этот вопрос был уже дан в разделе 8.3. Действительно, мы показали, что ортогональные биспиноры в общем случае могут быть представлены в виде

$$\psi_n = \exp\left(\frac{\Phi''}{2}\alpha_3\right) \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\alpha_{\Phi'}\right) \psi'_n,$$

поэтому в качестве quartiонов выступают следующие биспиноры:

$$\begin{aligned} \psi_\sigma^{(+)} &= \exp\left(\frac{\Phi''}{2}\alpha_3\right) \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\alpha_{\Phi'}\right) \begin{pmatrix} w^{(\sigma)}(\Theta', \Phi') \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \psi_\sigma^{(-)} &= \exp\left(\frac{\Phi''}{2}\alpha_3\right) \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\alpha_{\Phi'}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(\sigma)}(\Theta', \Phi') \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где спиноры $w^{(\sigma)}(\Theta', \Phi')$ определяются выражениями (8.53). Идентичность свойств полученных quartiонных состояний и свойств quartiонов (8.91) проявляется в следующем. Отметим, что

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_\sigma^{(+)} &= (w^{(\sigma)+}(\Theta', \Phi'), 0) \exp\left(\frac{\Phi''}{2}\alpha_3\right) \exp\left(\frac{\Theta''}{2}\alpha_{\Phi'}\right) \gamma_4 = \\ &= \bar{\psi}'_\sigma^{(+)} \exp\left(-\frac{\Phi''}{2}\alpha_3\right) \exp\left(-\frac{\Theta''}{2}\alpha_{\Phi'}\right), \end{aligned}$$

где

$$\psi'^{(+)}_\sigma = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)}(\Theta', \Phi') \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Следовательно,

$$\bar{\psi}_\sigma^{(+)} \psi_\sigma^{(+)} = \bar{\psi}'_\sigma^{(+)} \psi'^{(+)}_\sigma.$$

Несложно также видеть, что свойства ортогональности общих quartiонных состояний совпадают со свойствами ортогональности quartiонных состояний (8.91).

8.6.7. Взаимодействие с плоской электромагнитной волной.

Рассмотрим взаимодействие частицы с плоской монохроматической электромагнитной волной, потенциал которой определяется выражением

$$A_\mu(x) = A_\mu(\theta), \quad (8.101)$$

где

$$\theta = k_\mu x_\mu = \mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t.$$

Четырехмерный волновой вектор k_μ имеет вид

$$k_\mu = \left(\mathbf{k}, i\frac{\omega}{c} \right)$$

и удовлетворяет условию

$$k_\mu k_\mu = \mathbf{k}^2 - \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 = 0.$$

Условие лоренцевской калибровки для поля (8.101) имеет вид

$$k_\mu A'_\mu = 0, \quad (8.102)$$

где $A'_\mu = \partial A_\mu / \partial \theta$.

Используя условие калибровки (8.102), получаем

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = [\mathbf{kA}'], \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi = -\frac{1}{\kappa} [\mathbf{k} [\mathbf{kA}']],$$

где $\kappa = \omega/c$. Отсюда следует, что

$$\mathbf{BE} = 0, \quad \mathbf{B}^2 = \mathbf{E}^2.$$

Следовательно, собственные значения (8.9) и (8.12) равны нулю:

$$\lambda_n = 0. \quad (8.103)$$

Таким образом, мы видим, что взаимодействие спинорной частицы с полем плоской электромагнитной волны не приводит к изменению ее состояния по внутренним степеням свободы. Уравнение для каждой из пространственных волновых функций общего решения (8.57) совпадает с уравнением движения скалярной частицы и имеет вид

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(x) \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_0 \varphi(x) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] g_n(x) = 0.$$

Этот результат, впрочем, вполне очевиден и следует из вида уравнения (7.2). Действительно, слагаемое уравнения (7.2), определяющее движение по внутренним степеням свободы движения частицы, имеет вид

$$\gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu}.$$

Для электромагнитной волны с потенциалом (8.101) получаем

$$\gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu} = (\gamma_\mu A_\mu) (\gamma_\nu k_\nu).$$

Однако матрица $(\gamma_\mu k_\mu)$ является особенной (вырожденной), поскольку ее детерминант равен нулю. Действительно,

$$\text{Det} (\gamma_\mu k_\mu) = \left(\mathbf{k}^2 - \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \right)^2 = 0.$$

Следовательно, не существует матрицы, обратной матрице $(\gamma_\mu k_\mu)$, поэтому ее действие на произвольную биспинорную волновую функцию определяется выражением

$$(\gamma_\mu k_\mu) \Psi = 0.$$

Таким образом, движение спинорной частицы в электромагнитном поле, являющемся суперпозицией некоррелированных плоских монохроматических волн, совпадает с движением скалярной частицы в указанном электромагнитном поле.

Глава 9

ЗЕРКАЛЬНЫЕ СПИНОРНЫЕ ЧАСТИЦЫ

Специфика частиц, описываемых спинорными волновыми полями, состоит в наличии у них внутренних степеней свободы движения. Традиционно принято считать, что наличие внутренних степеней свободы проявляется лишь в возникновении собственного углового момента движения частиц, т. е. спина. Однако, как мы видели в предыдущих главах, в рамках теории, основанной на уравнении (7.2), спин не определяет полностью состояния частицы по внутренним степеням свободы, а его проекции являются лишь тремя из восьми характеристик (аксиального и полярного векторов, скаляра и псевдоскаляра), определяющих состояние частицы.

В настоящей главе на примере задачи о движении частицы в пространственно неоднородном стационарном электрическом поле мы покажем, что аксиальный и полярный векторы, скалярная и псевдоскалярная величины, необходимые для полного определения состояния спинорной частицы, образуют два 4-вектора: $M_\mu = (\mathbf{M}, \Gamma)$ и $P_\mu = (\mathbf{P}, N)$, которые полностью определяют состояние частицы по внутренним степеням свободы. Мы обсудим ряд закономерностей, которым удовлетворяют компоненты этих 4-векторов при движении частицы в пространственно неоднородном стационарном внешнем поле.

Задача о рассеянии частицы пространственно неоднородным электрическим полем дает наглядную иллюстрацию того, что задания спина недостаточно для полного определения состояния частицы по внутренним степеням свободы. Действительно, как мы покажем в настоящей главе, энергетические спектры коэффициентов отражения и прохождения в одномерной задаче рассеяния (в трехмерных задачах рассеяния говорят о сечении рассеяния) не зависят от спина, т. е. от магнитного момента налетающей частицы. При этом, однако, они существенно зависят от электрического момента падающей частицы.

Переход к волновому уравнению второго порядка по временной производной приводит к удвоению не только внутренних, но и трансляционных степеней свободы движения частицы. Наиболее ярким проявлением указанного расширения пространства состояний является появление в теории зеркальных частиц. В предыдущих главах была дана теория зеркальных скалярных частиц. В настоящей главе мы покажем, что зеркальные спинорные частицы обладают рядом специфических черт по сравнению со скалярными. Например, зеркальная спинорная частица не обязательно является частицей противоположного заряда.

Как показал анализ, проведенный в гл. 4–6, последовательная теория зеркальных частиц и их непротиворечивая физическая интерпретация могут быть основаны лишь на использовании понятий запрещенной зоны состояний и связанного с ним понятия отрицательной вероятности, которые неразрывно связаны с волновыми уравнениями, включающими вторую производную по времени, и являются их необходимым атрибутом.

Невозможность создания последовательной теории зеркальных частиц в рамках волновых уравнений, включающих лишь первую производную по времени, обусловлена тем, что факторизация оператора уравнения КГФ на два оператора первого порядка вдвое сужает пространство состояний частицы. Действительно, представление группы преобразований Лоренца включает операторы, осуществляющие как пространственно-пространственные, так и пространственно-временные вращения. В рамках теории скалярных полей переход к волновым уравнениям первого порядка по времени приводит к тому, что оператор \mathbf{k} , осуществляющий пространственно-временные вращения, становится оператором «буста», т. е. вспомогательным оператором, не имеющим физического смысла. Как мы видели в предыдущих главах, в рамках теорий, основанных на введении понятия отрицательной вероятности, все компоненты генератора преобразований $J_{\mu\nu}$ приобретают физический смысл.

Аналогичная ситуация имеет место и с генератором преобразования формы биспинорных волновых функций $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$, ответственным за внутренние степени свободы частицы. В рамках теорий, линейных по оператору $\hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$, пространственно-пространственные компоненты этого тензора соответствуют оператору спина или связанного с ним оператора магнитного момента $\mathbf{m} = \mu_B \boldsymbol{\Sigma}$, отвечающего физически наблюдаемой величине. Однако пространственно-временные компоненты этого тензора соответствуют оператору скорости $d\mathbf{r}/dt = c\boldsymbol{\alpha}$. Поскольку собственные значения оператора α_z равны ± 1 , то это приводит к одному из парадоксов квантовой механики, состоящему в том, что собственные значения скорости спинорной частицы равны скорости света. Это заведомо противоречит экспериментально наблюдаемым данным. В процессе развития квантовой механики было предложено достаточно большое количество теорий, интерпретирующих указанный парадокс [59]. Однако мы не будем здесь останавливаться на обсуждении этих интерпретаций. Дело в том, что указанный парадокс не является единственным парадоксом релятивистской квантовой механики, основанной на использовании волновых уравнений материального поля, включающих лишь первую производную по времени. Более принципиальным является, пожалуй, парадокс Клейна [16], состоящий в том, что при использовании уравнения Дирака для расчета коэффициента отражения частицы от потенциальной ступеньки высотой $U_0 > 2m_0c^2$ энергетический коэффициент отражения становится большим едини-

цы, а коэффициент прохождения становится отрицательным. Этот парадокс вызывает в последнее время повышенный интерес, стимулируемый исследованиями по расчету зонной структуры графена [19]. В настоящей главе мы покажем, что в рамках теории, основанной на использовании понятия отрицательной вероятности, этот парадокс находит последовательное разрешение и оказывается связанным с теорией зеркальных частиц. Как мы увидим, теории зеркальных спиновых и скалярных частиц имеют общие основы. Однако поскольку в случае скалярных полей коэффициент прохождения не принимает отрицательных значений, то исторически это обстоятельство осталось незамеченным.

Выше мы уже говорили, что переход от волновых уравнений с первой производной по времени к волновым уравнениям, включающим вторую производную по времени, вдвое расширяет размерность пространства как внутренних, так и трансляционных степеней свободы. Остановимся еще раз на обсуждении внутренних степеней свободы. Итак, в то время как состояние частицы, волновая функция которой подчиняется уравнению Дирака, задается одной векторной величиной, $\mathbf{M} = \mu_B \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi$, и одной скалярной, $N = \bar{\Psi} \Psi$, то состояние частицы, волновая функция которой подчиняется уравнению (7.2), задается восемью величинами: тремя компонентами аксиального вектора $\mathbf{M} = \mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi$, тремя компонентами полярного вектора $\mathbf{P} = \mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\gamma}_4 \boldsymbol{\gamma} \Psi = -i \mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi$, одной скалярной, $N = \bar{\Psi} \Psi$, и одной псевдоскалярной, $\Gamma = -i \bar{\Psi} \boldsymbol{\gamma}_5 \Psi$. Эти различия обусловлены тем, что факторизация оператора уравнения КГФ на два оператора, линейные по временной производной, приводит к тому, что верхний и нижний спиноры биспинорной волновой функции перестают быть независимыми. Даже при свободном движении частицы эти два спинора связаны друг с другом, т.е. состояние частицы по внутренним степеням свободы детерминировано трансляционным движением частицы как целого. Это приводит еще к одному парадоксу, состоящему в том, что перпендикулярные направлению движения свободной частицы компоненты спина являются неопределенными, поскольку операторы $\Sigma_{x,y}$ не коммутируют с оператором α_z и лишь проекция спина на направление движения Σ_z может иметь определенное значение. Напротив, свободное движение частицы, волновая функция которой подчиняется уравнению (7.2), не зависит от состояния частицы по внутренним степеням свободы, ее состояние может определяться произвольными векторами \mathbf{M}_0 и \mathbf{P}_0 .

9.1. Отражение от потенциальной ступеньки

Рассмотрим взаимодействие электрона со статическим пространственно неоднородным электрическим полем следующего вида:

$$\mathbf{E}(z) = \frac{E_0 \mathbf{e}_z}{\text{ch}^2 \beta z}.$$

Потенциальная энергия, соответствующая этому виду поля, определяется выражением

$$U(z) = -\frac{q_0 E_0}{\beta} (1 + \operatorname{th} \beta z) = U_0 \frac{1 + \operatorname{th} \beta z}{2}. \quad (9.1)$$

Уравнение (7.2) принимает в этом случае вид

$$\left[\Delta + \frac{(E - U(z))^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} + i \frac{2m_0 \mu_0 E_0}{\hbar^2} \frac{\alpha_z}{\operatorname{ch}^2 \beta z} \right] \Psi = 0. \quad (9.2)$$

Общий вид положительно частотного решения для частицы, взаимодействующей с электрическим полем, был определен в предыдущей главе и имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^4 \psi_n g_n(z) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) \exp(i \mathbf{k}_\perp \mathbf{r}), \quad (9.3)$$

где \mathbf{k}_\perp — проекция волнового вектора на плоскость, перпендикулярную оси z . Поскольку оператор \mathbf{p}_\perp коммутирует с оператором уравнения (9.2), то проекции импульса на плоскость, перпендикулярную оси z , остаются неизменными, поэтому, для краткости и не ограничивая общности, мы будем далее полагать $|\mathbf{k}_\perp| = 0$. Биспиноры ψ_n , входящие в (9.3), являются собственными волновыми функциями спиновой части уравнения (9.2), т. е. собственными функциями задачи на собственные значения (8.3), и имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

здесь $w^{(\pm)}$ — собственные волновые функции уравнения $(\mathbf{n} \mathbf{E} \boldsymbol{\sigma}) w^{(\pm)} = \pm w^{(\pm)}$. Как мы отмечали в предыдущей главе, биспиноры ψ_n отвечают безмассовым квартионам и соответствуют следующим собственным значениям:

$$\lambda_{1,2} = \mp i, \quad \lambda_{3,4} = \pm i.$$

Пространственные части волновых функций $g_n(z)$ являются решениями уравнений

$$\left[\Delta + \kappa^2 - \frac{EU_0}{\hbar^2 c^2} (1 + \operatorname{th} \beta z) + \frac{U_0^2}{4\hbar^2 c^2} (1 + \operatorname{th} \beta z)^2 + \lambda_n \frac{2m_0 \mu_0 E_0}{\hbar^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \beta z} \right] g_n(z) = 0, \quad (9.4)$$

где

$$\kappa = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}.$$

Вводя новую неизвестную функцию

$$g_n(z) = (1 + \operatorname{th} \beta z)^{-ik_1/2} (1 - \operatorname{th} \beta z)^{-ik_2/2} p_n(z)$$

и новую переменную

$$\xi = \operatorname{th} \beta z,$$

уравнение (9.4) можно преобразовать к следующему виду:

$$(1 - x^2) p_n''(z) + (-ik_1 + ik_2 - (2 - ik_1 - ik_2)x) p_n'(z) + \frac{1}{2} \left(\frac{(k_1 + k_2)^2}{2} + ik_1 + ik_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{U_0}{\hbar c \beta} \right)^2 - \lambda_n \frac{U_0}{\hbar c \beta} \frac{\mu_0}{\mu_B} \right) p_n(x) = 0, \quad (9.5)$$

где

$$k_1 = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c \beta}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{(E - U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c \beta}, \quad \mu_B = \frac{q_0 \hbar}{2m_0 c}. \quad (9.6)$$

Учитывая, что уравнение (9.5) имеет вид уравнения для гипергеометрических функций, общее решение уравнения (9.4) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} g_n(z) = & C_1 (\operatorname{ch} \beta z)^{i(k_1 + k_2)/2} \exp\left(-i \frac{k_1 - k_2}{2} \beta z\right) \times \\ & \times F\left(-s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}, 1 + s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}, 1 - ik_2, \eta\right) + \\ & + C_2 (\operatorname{ch} \beta z)^{i(k_1 - k_2)/2} \exp\left(-i \frac{k_1 + k_2}{2} \beta z\right) \times \\ & \times F\left(-s_n - i \frac{k_1 - k_2}{2}, 1 + s_n - i \frac{k_1 - k_2}{2}, 1 + ik_2, \eta\right), \end{aligned} \quad (9.7)$$

где

$$\begin{aligned} s_n = & \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - u_0^2 - 2\lambda_n u_0 \gamma_e} - 1 \right), \\ \eta = & \frac{1}{1 + \exp(2\beta z)} \end{aligned}$$

и мы ввели обозначения

$$\gamma_e = \frac{\mu_0}{\mu_B}, \quad u_0 = \frac{U_0}{\hbar c \beta}. \quad (9.8)$$

Учитывая вид собственных значений λ_n , несложно заключить, что имеют место следующие соотношения:

$$s_1 = s_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - u_0^2 + i2u_0 \gamma_e} - 1 \right) = s, \quad s_2 = s_3 = s^*. \quad (9.9)$$

Асимптотика решения (9.7) при $z \rightarrow \infty$ имеет вид

$$g_n(z) = C_1 \exp(ik_2 \beta z) + C_2 \exp(-ik_2 \beta z).$$

Положительно частотные решения уравнения (7.2), соответствующие частице, налетающей на потенциальный барьер (9.1) из области $z =$

$= -\infty$, должны иметь следующую асимптотическую форму при $z = \pm\infty$:

$$g_n(z) = \begin{cases} \exp(ik_1\beta z) + r_n \exp(-ik_1\beta z), & z \rightarrow -\infty, \\ t_n \exp(ik_2\beta z), & z \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Так же как и в разделе 5.1.5, здесь нужно сделать необходимые пояснения, состоящие в том, что величина $k_2(E)$, определяемая (9.6), имеет вид

$$k_2(E) = \frac{(E - U_0)}{\hbar c \beta} \sqrt{1 - \frac{m_0^2 c^4}{(E - U_0)^2}},$$

поэтому при $E > U_0$ требуемой асимптотической форме отвечает первое линейно независимое решение в (9.7), а при $E < U_0$ — второе. Однако поскольку при замене $k_2 \rightarrow -k_2$ второе линейно независимое решение в (9.7) совпадает с первым, то мы можем выбрать общее решение в виде (9.7) с $C_2 = 0$, положив при этом, что k_2 при любых значениях энергии налетающей частицы определяется выражением (9.6). В этом случае асимптотическая форма волновых функций (9.7) при $z \rightarrow -\infty$ имеет вид

$$g_n(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \frac{\Gamma(1 - ik_2) \Gamma(-ik_1)}{\Gamma(1 + s_n - i(k_1 + k_2)/2) \Gamma(-s_n - i(k_1 + k_2)/2)} \exp(ik_1\beta z) + \frac{\Gamma(1 - ik_2) \Gamma(ik_1)}{\Gamma(1 + s_n + i(k_1 - k_2)/2) \Gamma(-s_n + i(k_1 - k_2)/2)} \exp(-ik_1\beta z). \quad (9.10)$$

Таким образом, пространственные волновые функции $g_n(z)$, удовлетворяющие при $z \rightarrow \pm\infty$ требуемой асимптотической форме, имеют вид

$$g_n(z) = t_n (2 \operatorname{ch} \beta z)^{i(k_1 + k_2)/2} \exp\left(-i \frac{k_1 - k_2}{2} \beta z\right) \times \times F\left(-s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}, 1 + s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}, 1 - ik_2, \eta\right). \quad (9.11)$$

Уравнения (9.10) и (9.11) приводят к следующим выражениям для амплитудных коэффициентов отражения r_n и прохождения t_n :

$$r_n = \frac{\Gamma\left(1 + s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}\right) \Gamma\left(-s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}\right) \Gamma(ik_1)}{\Gamma\left(1 + s_n + i \frac{k_1 - k_2}{2}\right) \Gamma\left(-s_n + i \frac{k_1 - k_2}{2}\right) \Gamma(-ik_1)}, \quad (9.12)$$

$$t_n = \frac{\Gamma\left(1 + s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}\right) \Gamma\left(-s_n - i \frac{k_1 + k_2}{2}\right)}{\Gamma(-ik_1) \Gamma(1 - ik_2)}. \quad (9.13)$$

9.2. Коэффициенты отражения и прохождения

Итак, общее положительно частотное решение имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n g_n(z), \quad (9.14)$$

где C_n — постоянные коэффициенты, а $g_n(z)$ определяются выражениями (9.11). Коэффициенты C_n определяют состояние налетающей частицы. Действительно, в соответствии с (9.11) волновая функция налетающей частицы имеет вид

$$\Psi_0(z)|_{\beta z \ll -1} = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n \exp(ik_1 \beta z).$$

В свою очередь волновые функции отраженной Ψ_r и прошедшей Ψ_t частиц имеют вид

$$\Psi_r(z)|_{\beta z \ll -1} = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n r_n \exp(ik_1 \beta z),$$

$$\Psi_t(z)|_{\beta z \gg 1} = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n t_n \exp(ik_2 \beta z).$$

Закон сохранения заряда в процессе рассеяния частицы на одномерном потенциальном барьере (9.1) требует сохранения суммарного потока частиц через бесконечно удаленную поверхность. В одномерном случае это условие выражается равенством

$$\int_{z \rightarrow -\infty} \mathbf{j} d\mathbf{S} + \int_{z \rightarrow \infty} \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0.$$

Следовательно, энергетические коэффициенты отражения R и прохождения T определяются следующими выражениями:

$$R = \frac{\mathbf{e}_{-z} (\nabla \bar{\Psi}_r \cdot \Psi_r - \bar{\Psi}_r \cdot \nabla \Psi_r)|_{z \rightarrow -\infty}}{\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_0 \cdot \Psi_0 - \bar{\Psi}_0 \cdot \nabla \Psi_0)|_{z \rightarrow -\infty}},$$

$$T = \frac{\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_t \cdot \Psi_t - \bar{\Psi}_t \cdot \nabla \Psi_t)|_{z \rightarrow \infty}}{\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_0 \cdot \Psi_0 - \bar{\Psi}_0 \cdot \nabla \Psi_0)|_{z \rightarrow -\infty}}.$$

Подставляя в последние выражения вышеприведенные волновые функции, получаем

$$R = \frac{C_1^* C_3 r_1^* r_3 + C_1 C_3^* r_1 r_3^* + C_2^* C_4 r_2^* r_4 + C_2 C_4^* r_2 r_4^*}{C_1^* C_3 + C_1 C_3^* + C_2^* C_4 + C_2 C_4^*}, \quad (9.15)$$

$$T = \frac{K_2 C_1^* C_3 t_1^* t_3 + C_1 C_3^* t_1 t_3^* + C_2^* C_4 t_2^* t_4 + C_2 C_4^* t_2 t_4^*}{k_1 (C_1^* C_3 + C_1 C_3^* + C_2^* C_4 + C_2 C_4^*)}, \quad (9.16)$$

где

$$K_2 = \text{Re}(k_2).$$

Полагая

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_1 + B_1), & C_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_2 + B_2), \\ C_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_1 - B_1), & C_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_2 - B_2), \end{aligned}$$

для амплитуды волновой функции налетающей частицы получаем

$$\Psi_0 = A_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix} + B_1 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix} + B_2 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (9.17)$$

Таким образом, биспиноры при коэффициентах A_i отвечают положительным квартионным состояниям, а при коэффициентах B_i — отрицательным. Как видно из формул для коэффициентов отражения и прохождения, характер взаимодействия частицы с внешними полями существенно зависит от состояния налетающей частицы.

9.3. Зеркальные частицы

Рассмотрим сначала случай, когда налетающая частица находится в суперпозиции положительных квартионных состояний, т. е. положим $B_i = 0$. Представим коэффициенты $A_{1,2}$ в следующем виде:

$$A_1 = A\alpha_+, \quad A_2 = A\alpha_-, \quad (9.18)$$

где α_{\pm} являются амплитудами вероятности нахождения падающей частицы в состояниях $w^{(\pm)}$ и потому удовлетворяют соотношению

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1,$$

а коэффициент A определяется условием нормировки волновой функции, которое зависит не только от внутренних, но и от трансляционных степеней свободы движения частицы. Амплитуда волновой функции падающей частицы принимает в этом случае вид

$$\Psi_0 = A \sum_{\sigma=\pm 1} \begin{pmatrix} \alpha_{\sigma} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.19)$$

Соотношения (9.9) приводят к следующим соотношениям для амплитудных коэффициентов отражения r_n и прохождения t_n :

$$r_1 = r_4, \quad r_2 = r_3, \quad t_1 = t_4, \quad t_2 = t_3. \quad (9.20)$$

С учетом этих соотношений выражения для энергетических коэффициентов отражения (9.15) и прохождения (9.16) принимают вид

$$R = \frac{1}{2}(r_1^* r_2 + r_1 r_2^*), \quad T = \frac{1}{2} \frac{K_2}{k_1} (t_1^* t_2 + t_1 t_2^*). \quad (9.21)$$

Используя формулы (9.12) и (9.13), для энергетических коэффициентов отражения R и прохождения T окончательно получаем

$$R = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2 \pi s^* + \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 - K_2) / 2)}{\sin^2 \pi s^* + \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 + K_2) / 2)} + \frac{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 - K_2) / 2)}{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 + K_2) / 2)} \right], \quad (9.22)$$

$$T = \frac{1}{2} \left[\frac{\operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 + K_2) / 2) - \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 - K_2) / 2)}{\sin^2 \pi s^* + \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 + K_2) / 2)} + \frac{\operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 + K_2) / 2) - \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 - K_2) / 2)}{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2 (\pi (k_1 + K_2) / 2)} \right]. \quad (9.23)$$

Несложно видеть, что энергетические коэффициенты отражения и прохождения удовлетворяют условию

$$R + T \equiv 1. \quad (9.24)$$

При $K_2 = 0$ из (9.22)–(9.24) получаем: $R = 1$ и $T = 0$. Следовательно, энергетическая граница области полного отражения определяется условием

$$E_{th} = U_0 \pm m_0 c^2. \quad (9.25)$$

При $U_0 < 2m_0 c^2$ пороговое значение кинетической энергии за вычетом массы покоя налетающей частицы определяется величиной

$$\Delta E_{th} = E_{th} - m_0 c^2 = U_0.$$

При $U_0 > 2m_0 c^2$ получаем два порога:

$$\Delta E_{th}^{(1)} = U_0 - 2m_0 c^2, \quad \Delta E_{th}^{(2)} = U_0.$$

Рисунок 9.1 иллюстрирует зависимость энергетических коэффициентов отражения и преломления от энергии налетающей частицы. Кривые на рис. 9.1, *a* и *б* показывают энергетические зависимости коэффициентов отражения и преломления соответственно для случая $U_0 = 0,1 \cdot m_0 c^2$. Зависимости коэффициентов отражения и преломления имеют в этом случае стандартный вид: коэффициент отражения равен единице при $\Delta E \leq \Delta E_{th}$ и падает до нуля при $\Delta E > \Delta E_{th}$, коэффициент прохождения равен нулю при $\Delta E \leq \Delta E_{th}$ и стремится к единице с ростом энергии налетающей частицы в области $\Delta E > \Delta E_{th}$. Кривые на рис. 9.1, *в* и *г* показывают соответствующие зависимости для случая рассеяния электрона электростатическим потенциалом $U_0 = 4m_0 c^2$. В этом случае границы области полного отражения определяются следующими выражениями: $\Delta E_{th}^{(2)} = 2m_0 c^2$ и $\Delta E_{th}^{(1)} = 4m_0 c^2$. Несложно видеть, что коэффициент отражения в пределах этой области равен единице, а коэффициент прохождения равен нулю. При $\Delta E > \Delta E_{th}^{(2)}$ коэффициент отражения падает до нуля, а коэффициент отражения стремится к единице.

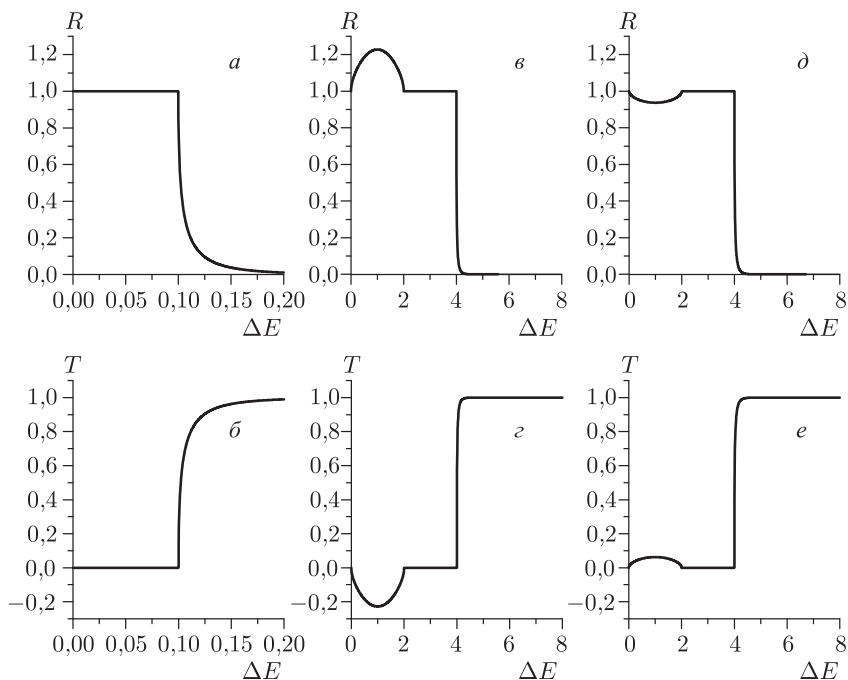


Рис. 9.1. Энергетические зависимости коэффициентов отражения R и прохождения T при высоте потенциальной ступеньки $U_0 = 0,1m_0c^2$ (а, б); $4m_0c^2$ (в, г) и величине магнетона, совпадающей с экспериментально измеренным значением для электрона: $\mu_0/\mu_B = 1,0011596521883$. Кривые (д), (е) дают коэффициенты отражения и прохождения соответственно для частицы с величиной магнетона $\mu_0 = 2\mu_B$, налетающей на потенциальную ступеньку высотой $U_0 = 4m_0c^2$

Необычный вид имеет зависимость коэффициентов отражения и преломления в области $0 < \Delta E < 2m_0c^2$. Коэффициент отражения в этой области больше единицы, а коэффициент прохождения принимает отрицательные значения. Напомним, что при этом $R + T \equiv 1$, следовательно, суммарный заряд и энергия остаются неизменными. С такими необычными зависимостями коэффициентов отражения и прохождения мы уже встречались в случае скалярных релятивистских частиц (см. раздел 5.1.2), где было показано, что при $U_0 > 2m_0c^2$ в области скачка потенциала рождается зеркальная частица, которая движется навстречу падающей. В случае скалярных полей заряд зеркальной частицы противоположен заряду падающей частицы, поскольку плотность заряда прошедшей частицы определяется выражением

$$\rho_t = \frac{q_0}{m_0c^2} (E - U_0) |A|^2 |t|^2, \quad (9.26)$$

где A — нормировочный коэффициент, а t — коэффициент прохождения, определяемый формулой (5.39).¹⁾ Следовательно, для скалярной частицы при $E < U_0$ получаем: $\rho_t < 0$.

В случае спинорных полей волновая функция прошедшей частицы с учетом обозначений (9.18) принимает вид

$$\Psi_t(z) = \frac{A}{2} \begin{pmatrix} (\alpha_+ w^{(+)} + \alpha_- w^{(-)}) (t_1 + t_2) \\ (\alpha_+ w^{(+)} - \alpha_- w^{(-)}) (t_1 - t_2) \end{pmatrix} \exp(ik_2 \beta z), \quad (9.27)$$

поэтому плотность заряда прошедшей частицы зависит не только от знака множителя $(E - U_0)$, но и от знака нормы $N_t = \bar{\Psi}_t \Psi_t$ волновой функции (9.27):

$$\rho_t = \frac{q_0}{m_0 c^2} (E - U_0) \bar{\Psi}_t \Psi_t. \quad (9.28)$$

Норма волновой функции (9.27) определяется выражением

$$N_t = \frac{|A|^2}{2} (t_1^* t_2 + t_1 t_2^*),$$

т.е. знак нормы совпадает со знаком коэффициента прохождения T , определяемого формулой (9.21). Несложно видеть, что в случае $E < U_0$ и $N_t < 0$ знак плотности заряда прошедшей частицы (9.28) совпадает со знаком плотности заряда падающей частицы.

В случае $E < U_0$ групповая скорость прошедшей частицы отрицательна, так же как и в скалярном случае. Это проиллюстрировано на рис. 9.2, где показана зависимость потенциальной энергии $U(z) = U_0 (1 + \text{th}(\beta z)) / 2$ от координаты z для случая отталкивающего потенциала. Заштрихованная область соответствует запрещенной зоне $\Delta E = 2m_0 c^2$. Слева показан вид сечения гиперплоскости состояний в области до скачка потенциала ($\beta z \ll -1$), а справа — в области после скачка потенциала ($\beta z \gg 1$). Если состояние налетающей частицы определяется точкой 1, то состояние отраженной частицы определяется точкой r_1 , а прошедшей — точкой t_1 . Коэффициенты отражения R и прохождения T оба являются в этом случае положительными. Если состояние налетающей частицы определяется точкой 2, то состоянию отраженной частицы соответствует точка r_2 , а прошедшей — точка t_2 . Как видно из рис. 9.1, коэффициент отражения при этом больше еди-

¹⁾ Приведенная формула наглядно демонстрирует непоследовательность модели плоских волн, поскольку интегрирование по полубесконечному объему приводит к бесконечной величине заряда частицы. Модель падающего волнового пакета свободна от указанных недостатков и для скалярных полей была рассмотрена нами в разделе 5.2. Однако здесь мы ограничимся пока сравнением формул для случая, когда состояние падающей частицы задается в виде плоской волны, поскольку, во-первых, сейчас нам важен лишь знак плотности заряда и, во-вторых, случай падающего волнового пакета будет рассмотрен в разделе 9.5.

ницы, а коэффициент прохождения отрицателен. Точка возбуждения t_2 является точкой дисперсионной кривой с отрицательной дисперсией, т. е. $\partial k / \partial \omega < 0$. Как мы видели в гл. 5, состояния в области отрицательной дисперсии соответствуют состояниям зеркальных частиц. Групповая скорость волнового пакета зеркальных частиц отрицательна, т. е. зеркальная частица движется навстречу падающей.

На рис. 9.3 показана пространственно-временная динамика волнового пакета со средней энергией $E_0 = 2m_0c^2$, падающего на потенциальную ступеньку высоты $U_0 = 4m_0c^2$, пространственная ширина волнового пакета полагалась равной $l_0 = c\tau_0 = 3\lambda_C$. Как видно, зеркальная волна находится в отрицательном квартионном состоянии, т. е. является зеркальной античастицей. Центральная часть верхнего рисунка показана на нижнем рисунке в увеличенном масштабе. В области ненулевого электрического поля происходит интерференционное взаимодействие падающей и зеркальной волн, приводящее к формированию отраженной волны в положительном квартионном состоянии.

Как следует из формулы (9.26), заряд зеркальной частицы в скалярном случае противоположен заряду падающей. Поскольку зеркальная частица движется навстречу падающей, то соответствующая ей плотность тока в плоскости $z = +\infty$ совпадает по знаку с плотностью тока падающей частицы в плоскости $z = -\infty$, поэтому в скалярном случае $T > 0$. В спинорном случае заряд зеркальной частицы может как совпадать с зарядом падающей частицы, так и быть противоположным ему, поскольку норма волновой функции (9.27) может быть как положительной, так и отрицательной. Кривые на рис. 9.1, *в, г* относятся к случаю, когда магнитный момент падающей частицы совпадает с магнитным моментом электрона: $\mu_0 / \mu_B = 1,0011596521883$. В этом случае норма волновой функции (9.27) в диапазоне энергий $0 \leq \Delta E \leq 2m_0c^2$ отрицательна, поэтому заряд зеркальной частицы, как следует из (9.28), совпадает по знаку с зарядом падающей, т. е. зеркальная частица является, по сути дела, зеркальной античастицей. Поскольку зеркальная частица движется навстречу падающей, то соответствующая ей плотность тока в плоскости $z = +\infty$ отрицательна, поэтому $T < 0$. На рис. 9.1, *д, е* в иллюстративных целях показаны энергетические коэффициенты отражения (*д*) и преломления (*е*) при рассеянии гипотетической частицы, имеющей магнитный момент $\mu_0 = 2\mu_B$, на той же потенциальной ступеньке $U_0 = 4m_0c^2$. В этом случае норма волновой функции (9.27) в диапазоне энергий налетающей частицы $0 \leq \Delta E \leq 2m_0c^2$ является положительной, поэтому поведение коэффициентов отражения и прохождения качественно совпадает с поведением соответствующих коэффициентов для скалярной частицы.

В заключение отметим одно очень важное обстоятельство, связанное с тем, что условие $U_0 > 2m_0c^2$ является необходимым, но не достаточным условием появления зеркальных частиц. Так же как и в случае

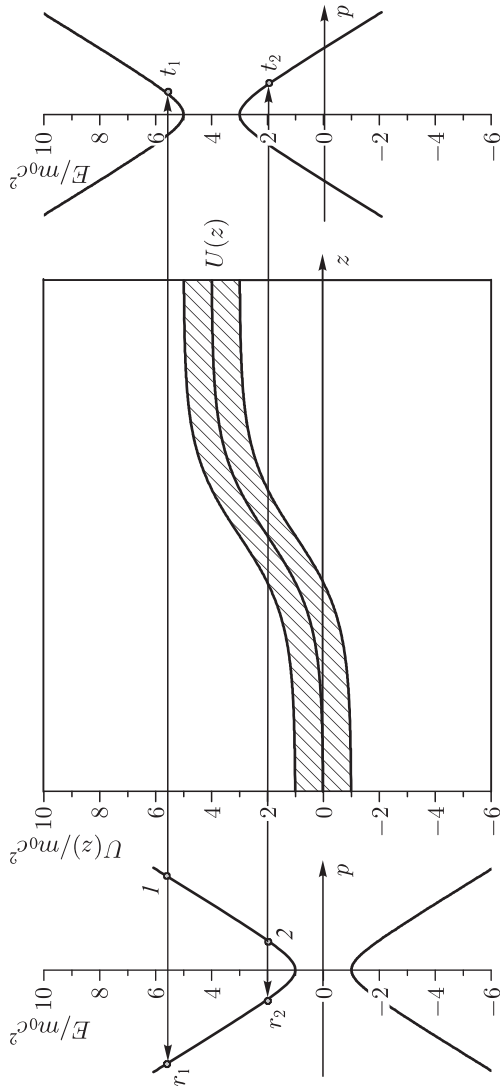


Рис. 9.2. Пространственный профиль запрещенной зоны состояний и вид сечения гиперплоскости состояний частицы в области до барьера $z < 0$ (слева) и после барьера $z > 0$ (справа)

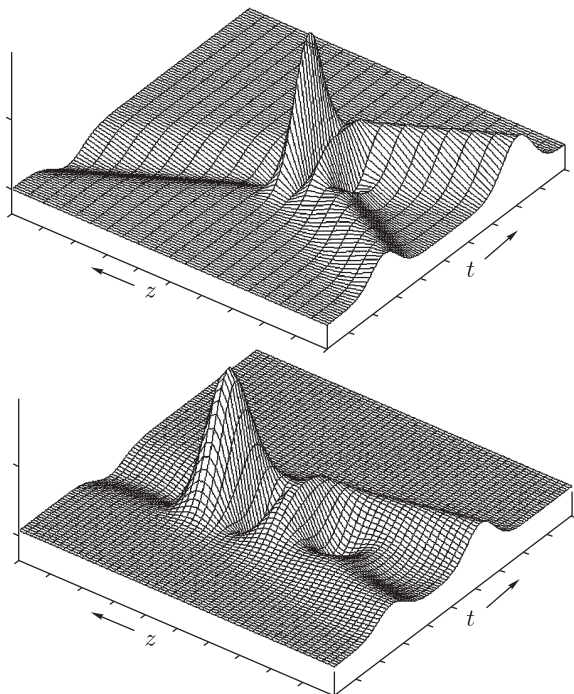


Рис. 9.3. Пространственно-временная динамика эволюции волнового пакета при энергии налетающей частицы $E_0 = 2m_0c^2$ и высоте потенциального барьера $U_0 = 4m_0c^2$. Координата z меняется в пределах $-3l \leq z \leq 3l$, пространственный размер падающего волнового пакета $l_0 = c\tau_0 = 3\lambda_C$, где λ_C — комптоновская длина волны частицы. На нижнем рисунке показана центральная часть верхней картинки в увеличенном масштабе

скалярных частиц, принципиальное значение имеет величина параметра (5.42)

$$\delta_C = \frac{m_0c}{\hbar\beta} = \frac{k_C}{\beta},$$

определяющего отношение ширины переходного слоя $l = \beta^{-1}$ к комптоновской длине волны $\lambda_C = 2\pi/k_C$. Амплитуда волновой функции зеркальных частиц сравнима с амплитудой волновой функции падающей частицы лишь при $\delta_C \leq 1$. С ростом величины параметра δ_C амплитуда волновой функции зеркальных частиц начинает уменьшаться, и в случае $\delta_C \gg 1$ область полного отражения частицы начинает занимать всю область $0 \leq \Delta E \leq U_0$. Зависимость амплитуды прошедшей волны от величины указанного параметра качественно совпадает с соответствующими зависимостями, показанными на рис. 5.6, для скалярной частицы.

9.4. Векторы электрической и магнитной поляризации

Как мы отмечали ранее, одно из основных отличий уравнения (7.2) от уравнения Дирака состоит в том, что оператор спина коммутирует с оператором уравнения (7.2) для свободной частицы, поэтому состояние свободной частицы по внутренним степеням свободы ее движения никак не связано с ее трансляционным движением. Следовательно, спин падающей свободной частицы может быть ориентирован в произвольном направлении. В рассматриваемом случае в качестве оси z системы координат, определяющей трансляционное движение частицы, мы выбрали направление вектора электрического поля, поскольку поперечные компоненты импульса частицы p_x и p_y остаются неизменными.

Рассмотрим задачу о рассеянии электрическим полем пучка поляризованных частиц, находящихся в суперпозиции положительных квартионных состояний. В этом случае вектор электрической поляризации падающих частиц равен нулю и состояние частиц по внутренним степеням свободы определяется лишь направлением вектора магнитной поляризации, который параллелен или антипараллелен направлению спина (в зависимости от знака μ_0). Положим, что направление вектора магнитной поляризации падающих частиц определяется углами θ и φ в системе координат, определяющей трансляционное движение частицы, тогда волновую функцию падающей частицы можно записать в виде

$$\Psi_0(z) = A \left[\alpha_+ \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_- \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix} \right] \exp(ik_1\beta z), \quad (9.29)$$

где теперь

$$\alpha_+ = \cos \frac{\theta}{2} \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right), \quad \alpha_- = \sin \frac{\theta}{2} \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right)$$

и

$$w^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Формулу (9.29) можно переписать в виде

$$\Psi_0(z) = A \begin{pmatrix} w_{\mathbf{n}} \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ik_1\beta z),$$

где

$$w_{\mathbf{n}} = \alpha_+ w^{(+)} + \alpha_- w^{(-)} \quad (9.30)$$

и спинор $w_{\mathbf{n}}$ удовлетворяет соотношению

$$(\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}) w_{\mathbf{n}} = w_{\mathbf{n}},$$

т.е. спинор $w_{\mathbf{n}}$ является собственной функцией оператора $(\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma})$, отвечающей положительной единичной проекции указанного оператора на направление единичного вектора \mathbf{n} , задаваемого углами θ и φ .

Как мы отмечали в гл. 7, полное задание состояния частицы, описываемой биспинорной волновой функцией, осуществляется восьмью действительными величинами, в качестве которых выступают:

скалярная величина $N = \bar{\Psi}\Psi$, псевдоскалярная величина $\Gamma = -i\bar{\Psi}\gamma_5\Psi$ и шесть проекций векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} . Таким образом, состояние падающей частицы с волновой функцией (9.29) определяется следующими параметрами:

$$N_0 = \bar{\Psi}_0\Psi_0 = |A|^2, \quad (9.31a)$$

$$\mathbf{M}_0 = \bar{\Psi}_0\boldsymbol{\Sigma}\Psi_0 = |A|^2 (\mathbf{e}_x \sin \theta \cos \varphi + \mathbf{e}_y \sin \theta \sin \varphi + \mathbf{e}_z \cos \theta), \quad (9.31b)$$

$$\mathbf{P}_0 = -i\bar{\Psi}_0\boldsymbol{\alpha}\Psi_0 = 0, \quad (9.31в)$$

$$\Gamma_0 = -i\bar{\Psi}_0\gamma_5\Psi_0 = 0. \quad (9.31г)$$

Несложно видеть, что углы θ и φ в состоянии с волновой функцией (9.29) определяют ориентацию вектора $\mathbf{M}_0 = \bar{\Psi}_0\boldsymbol{\Sigma}\Psi_0$ в системе координат, в которой направление орта \mathbf{e}_z совпадает с направлением вектора напряженности электрического поля.

Таким образом, падающая частица, описываемая волновой функцией (9.29), может находиться в состоянии с произвольным направлением вектора магнитной поляризации и обладает равным нулю вектором электрической поляризации. Равенство нулю вектора электрической поляризации падающей частицы обусловлено тем, что нижний спинор волновой функции (9.29) равен нулю. Однако волновые функции прошедшей и отраженной частиц отличаются от волновой функции падающей частицы.

Действительно, волновая функция прошедшей частицы определяется выражением (9.27), а волновая функция отраженной частицы имеет вид

$$\Psi_r(z) = \frac{A}{2} \left(\begin{array}{l} (\alpha_+ w^{(+)} + \alpha_- w^{(-)}) (r_1 + r_2) \\ (\alpha_+ w^{(+)} - \alpha_- w^{(-)}) (r_1 - r_2) \end{array} \right) \exp(-ik_1\beta z). \quad (9.32)$$

Используя эту волновую функцию, получаем

$$N_r = \frac{|A|^2}{2} (r_1^* r_2 + r_1 r_2^*), \quad (9.33a)$$

$$M_x = \frac{|A|^2}{2} (|r_1|^2 + |r_2|^2) \sin \theta \cos \varphi, \quad (9.33б)$$

$$M_y = \frac{|A|^2}{2} (|r_1|^2 + |r_2|^2) \sin \theta \sin \varphi, \quad (9.33в)$$

$$M_z = \frac{|A|^2}{2} (r_1^* r_2 + r_1 r_2^*) \cos \theta, \quad (9.33г)$$

$$P_x = -\frac{|A|^2}{2} (|r_1|^2 - |r_2|^2) \sin \theta \sin \varphi, \quad (9.33д)$$

$$P_y = \frac{|A|^2}{2} (|r_1|^2 - |r_2|^2) \sin \theta \cos \varphi, \quad (9.33е)$$

$$P_z = i\frac{|A|^2}{2} (r_1^* r_2 - r_1 r_2^*), \quad (9.33ж)$$

$$\Gamma_r = -i\frac{|A|^2}{2} (r_1^* r_2 - r_1 r_2^*) \cos \theta. \quad (9.33з)$$

На рис. 9.4 показаны в сравнении энергетические зависимости коэффициента отражения (а), продольной проекции вектора электрической поляризации P_z (б) и поперечной проекции вектора магнитной поляризации M_x (в). Как видно из рисунка, при $\theta > 0$ продольная и поперечные компоненты вектора магнитной поляризации отличны от нуля практически во всей области отражения. Продольная компонента вектора электрической поляризации отраженной частицы отлична от нуля в области, где $R(\Delta E) > 1$, и при энергии налетающей частицы чуть выше верхнего порога области полного отражения. Зависимость величины поперечных компонент вектора электрической поляризации от энергии налетающей частицы аналогична зависимостям поперечных компонент вектора магнитной поляризации.

Замечания

1. Независимо от состояния магнитной поляризации падающей частицы отраженная частица вне области полного отражения имеет нену-

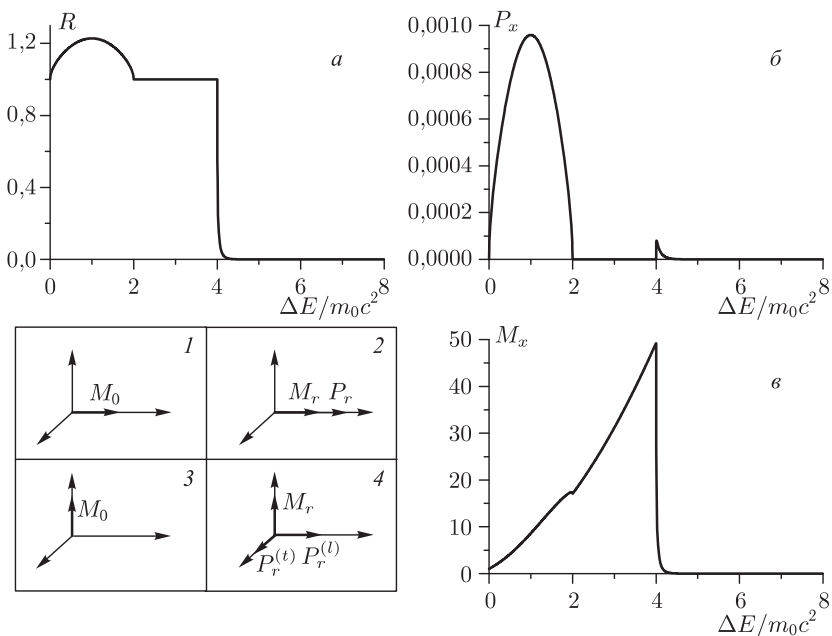


Рис. 9.4. Энергетические зависимости коэффициента отражения (а), продольной проекции вектора электрической поляризации P_z (б) и поперечной проекции вектора магнитной поляризации M_x (в). На вставках показано взаимное расположение векторов магнитной и электрической поляризации отраженной частицы в случае, когда вектор магнитной поляризации падающей частицы совпадает с направлением рассеивающего поля (вставки 1 и 2), и в случае, когда вектор магнитной поляризации падающей частицы перпендикулярен направлению рассеивающего поля (вставки 3 и 4)

левую проекцию вектора электрической поляризации на направление вектора напряженности рассеивающего электрического поля.

2. Проекция вектора магнитной поляризации отраженной частицы на направление рассеивающего поля определяется выражением

$$M_z = M_{0z}R.$$

3. Если вектор магнитной поляризации падающей частицы совпадает с направлением рассеивающего поля или противоположен ему, $\theta = 0, \pi$, то поперечные компоненты векторов электрической $P_{x,y}$ и магнитной $M_{x,y}$ поляризации равны нулю (см. вставки 1 и 2 на рис. 9.4).

4. Если направление вектора магнитной поляризации падающей частицы не совпадает с направлением рассеивающего электрического поля ($0 < \theta < \pi$), то отраженная частица имеет ненулевые значения поперечных компонент векторов электрической и магнитной поляризации (см. вставки 3 и 4 на рис. 9.4).

5. Поперечные компоненты векторов электрической и магнитной поляризации отраженной частицы взаимно перпендикулярны друг другу:

$$M_x P_x + M_y P_y = 0.$$

Отметим, что состояние прошедшей частицы определяется формулами (9.33) при замене в них амплитудных коэффициентов отражения r_i на соответствующие амплитудные коэффициенты прохождения t_i .

9.5. Заряд, магнитный и электрический моменты частиц

Как было показано в предыдущих главах, основными характеристиками скалярного материального поля, которые трансформируются в процессе взаимодействия скалярной частицы с электромагнитным полем, являются локальная плотность заряда и локальная масса. В соответствии с формулами раздела 6.4.3 изменения массы происходят лишь непосредственно в области скачка потенциала, поэтому падающая частица и порождаемая ею зеркальная частица, находящиеся вдали от области скачка потенциала, могут отличаться лишь знаком заряда.

Частица, описываемая спинорным материальным полем, имеет внутренние степени свободы, поэтому различные состояния материального поля, т. е. различные типы частиц, отличаются друг от друга не только зарядами, но и другими характеристиками. Если волновая функция падающей частицы определяется выражением (9.29), то ее состояние определяется параметрами (9.31). Формулы (9.33а–з) определяют состояние отраженной частицы. Состояние прошедшей частицы определяется формулами, которые получаются из (9.33) заменой $r_{1,2} \rightarrow t_{1,2}$, поэтому мы не будем их здесь выписывать.

9.5.1. Сохранение заряда. Закон сохранения заряда является следствием уравнения непрерывности. Задавая состояние падающей частицы в виде волнового пакета и интегрируя уравнение непрерывности, мы приходим к строгим математическим соотношениям, выражающим закон сохранения заряда, как это было показано в разделе 5.1.6. Отметим, что 4-вектор плотности тока спинорного поля является суммой трансляционной и спиновой частей, каждая из которых по отдельности удовлетворяет уравнению непрерывности, поэтому при анализе закона сохранения заряда мы можем рассмотреть каждую из частей по отдельности. Как следует из формул (7.17), уравнение непрерывности для спиновой части плотности тока выполняется автоматически, а поскольку трансляционная часть плотности тока имеет одинаковый вид для скалярного и спинорного полей, то при ее анализе мы можем воспользоваться результатами раздела 5.1.6.

В частности, при произвольном профиле падающего волнового пакета полный заряд в момент времени t определяется выражением (5.48), имеющим вид

$$q(t) = q_0 \left[\theta(-t') \int |A(\omega)|^2 d\omega + \theta(t') \int |A(\omega)|^2 R(\omega) d\omega + \theta(t' \operatorname{sgn}(\hbar\omega - U_0)) \int |A(\omega)|^2 \frac{\hbar\omega - U_0}{|\hbar\omega - U_0|} T(\omega) d\omega \right], \quad (9.34)$$

где $t' = t - L/v_1$. Отметим, что в момент времени $t' = 0$ падающий волновой пакет достигает области скачка потенциала. Спектральная амплитуда $A(\omega)$ зависит от профиля падающего импульса и удовлетворяет условию нормировки: $\int |A(\omega)|^2 d\omega = 1$. В (9.34) мы воспользовались асимптотическим выражением для пространственных волновых функций (9.11), поэтому закон сохранения заряда имеет вид

$$q(t_2) = q(t_1),$$

где в качестве моментов времени t_1 и t_2 выбираются моменты времени, когда падающий и отраженный волновые пакеты находятся на расстояниях $d_{1,2}$ от области скачка потенциала, значительно превышающих их пространственные размеры, так что выполняются следующие соотношения: $L > d_{1,2} \gg c\tau(0) + \beta^{-1}$, а $\tau(z)$ определяет временную длительность волнового пакета в точке z (см. раздел 4.2.2).

В случае надбарьерного прохождения частицы из (9.34) получаем

$$q_0 (R(\omega) + T(\omega)) = q_0,$$

а в случае рождения зеркальных частиц

$$q_0 R(\omega) = q_0 - q_0 T(\omega).$$

Таким образом, в обоих случаях закон сохранения заряда выполняется, поскольку вне зависимости от знака коэффициентов R и T согласно формулам (9.22)–(9.23) имеет место соотношение $R(\omega) + T(\omega) \equiv 1$.

9.5.2. Норма волновой функции. Остановимся подробнее на обсуждении знака нормы волновой функции. Запишем формулы (9.27) и (9.32) в следующем виде:

$$\Psi_{r,t} = \begin{pmatrix} u_{r,t} \\ d_{r,t} \end{pmatrix}, \quad (9.35)$$

где, например,

$$u_r = \frac{1}{2} (\alpha_+ w^{(+)} + \alpha_- w^{(-)}) (r_1 + r_2),$$

$$d_r = \frac{1}{2} (\alpha_+ w^{(+)} - \alpha_- w^{(-)}) (r_1 - r_2).$$

Несмотря на то что волновая функция падающей частицы является суперпозицией положительных квартионных состояний, волновые функции рассеянных частиц являются суперпозициями положительных и отрицательных квартионов. Норма волновой функции равна разности суммарных норм волновых функций положительных и отрицательных квартионов:

$$N_{r,t} = \overline{\Psi}_{r,t} \Psi_{r,t} = N_u^{(r,t)} - N_d^{(r,t)},$$

где $N_u^{(r,t)} = u_{r,t}^+ u_{r,t}$ и $N_d^{(r,t)} = d_{r,t}^+ d_{r,t}$. Как видно, норма волновых функций рассеянных частиц может быть как положительной, так и отрицательной. Отметим, что, учитывая свойства спиноров $w^{(\sigma)}$, величины $n_u^{(r)} = |(r_1 + r_2)/2|^2$ и $n_d^{(r)} = |(r_1 - r_2)/2|^2$ можно назвать числами заполнения положительных и отрицательных квартионных состояний соответственно. На рис. 9.5 представлены энергетические зависимости коэффициентов отражения (a) и прохождения (d) для случая рассеяния частицы на потенциальном барьере (9.1) с высотой потенциальной ступеньки $U_0 = 4m_0c^2$. Эти зависимости совпадают с зависимостями, представленными на рис. 9.1. Кривые на рис. 9.1, b, e показывают энергетические зависимости чисел заполнения положительных квартионных состояний в отраженной и прошедшей волнах, а кривые на рис. 9.1, $в, ж$ — отрицательных квартионных состояний. Кривые, приведенные на этом рисунке, рассчитаны для случая, когда вектор магнитной поляризации падающей частицы ориентирован в направлении вектора напряженности рассеивающего электрического поля. Это означает, что угол θ в (9.31б) равен нулю. Как видно из рисунка, положительность нормы волновой функции отраженной частицы в области $0 < \Delta E < 2m_0c^2$ при заданных значениях параметров задачи обеспечивается тем, что $N_u^{(r)} > N_d^{(r)}$. Следует, однако, отметить, что при этом $N_{u,d}^{(r)} > 0$ и $N_u^{(r)} > N_r$, т. е. состояние частицы является суперпозицией большого числа положительных и отрицательных квартионов. В свою очередь $N_u^{(t)} < N_d^{(t)}$, поэтому норма волновой функции зеркальной частицы является отрицательной.

9.5.3. Электрический и магнитный моменты. Отличительной чертой частицы, находящейся в одном из квартионных состояний, является равенство нулю вектора электрической поляризации. Как мы

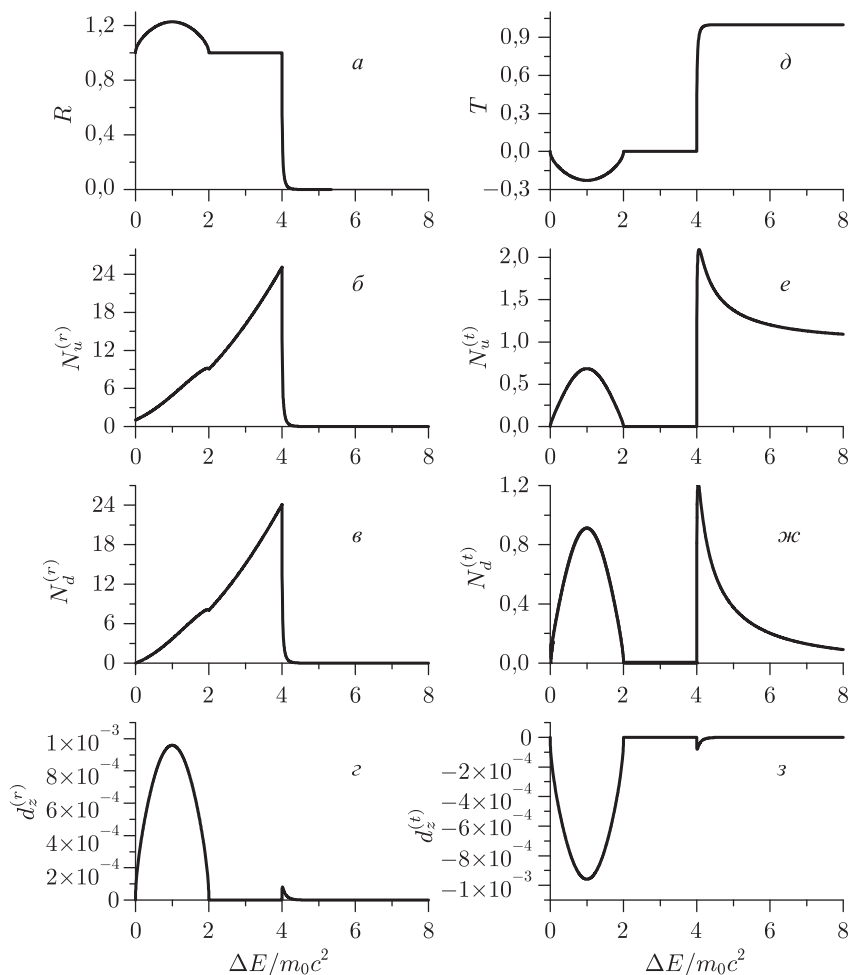


Рис. 9.5. Энергетические зависимости коэффициента отражения (а) и прохождения (д), чисел заполнения положительного и отрицательного квартионных состояний в отраженной (б и в соответственно) и прошедшей (е и ж соответственно) волнах, а также проекций вектора электрического момента на направление рассеивающего электрического поля отраженной (з) и «прошедшей» (и) волн

отмечали в предыдущих главах, вектор электрической поляризации отличен от нуля только в случае, когда волновая функция является суперпозицией положительных и отрицательных квартионных состояний ($N_u \neq 0$ и $N_d \neq 0$). С одной стороны, это следует из антидиагональности оператора α . С другой стороны, базируясь на вышеприведенном обсуждении, возникновение ненулевого электрического момента можно

интерпретировать следующим образом. В случае когда падающая волна имеет вид положительного квартиона, поляризованного по направлению вектора напряженности электрического поля, волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} w^{(+)}(g_1(z) + g_2(z)) \\ w^{(+)}(g_1(z) - g_2(z)) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} \frac{g_1(z) + g_2(z)}{2} + \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix} \frac{g_1(z) - g_2(z)}{2}. \end{aligned}$$

Как мы уже отмечали ранее, волновые функции отраженной и зеркальной частиц являются суперпозициями положительных и отрицательных квартионов. Положительный и отрицательный квартионы отвечают противоположным знакам заряда, и, как видно, их пространственные волновые функции различны. Именно различия в пространственном распределении плотности положительного и отрицательного зарядов приводят к появлению ненулевого вектора электрической поляризации. Вместе с тем, как мы видели выше, пространственный интеграл обеспечивает выполнение закона сохранения заряда.

Операторы α_z и Σ_z коммутируют с оператором уравнения (9.2), поэтому они отвечают сохраняющимся величинам. Сохраняющимися величинами, отвечающими указанным оператором, являются соответствующие проекции векторов электрического и магнитного моментов частицы, которые в соответствии с общей формулой (7.62) определяются следующими соотношениями:

$$\mathbf{d} = \frac{-i\mu_0}{m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \boldsymbol{\alpha} \Psi - \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - q_0 \varphi \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi \right] dV, \quad (9.36)$$

$$\mathbf{m} = \frac{\mu_0}{m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \boldsymbol{\Sigma} \Psi - \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - q_0 \varphi \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi \right] dV. \quad (9.37)$$

Как мы уже отмечали в разделе 7.5.3, выражения (9.36) и (9.37) отличаются от выражения для заряда частицы тем, что выражение $\bar{\Psi}_a q_0 I \Psi_a$ в плотности заряда (где $\bar{\Psi}_a$ — амплитуда волновой функции падающей, отраженной и прошедшей волн, т.е. $a = 0, r, t$ соответственно) заменяется на следующие: $-i\mu_0 \bar{\Psi}_a \boldsymbol{\alpha} \Psi_a$ и $\mu_0 \bar{\Psi}_a \boldsymbol{\Sigma} \Psi_a$.

Падающая частица, находящаяся в состоянии с волновой функцией (9.19), характеризуется нулевым значением вектора электрической поляризации: $\mathbf{P}_0 = -i\bar{\Psi}_0 \boldsymbol{\alpha} \Psi_0 = 0$, и нулевым значением псевдоскалярной величины: $\Gamma_0 = -i\bar{\Psi}_0 \gamma_5 \Psi_0 = 0$.

Используя вышеприведенные формулы, для z -проекции магнитного момента получаем

$$\begin{aligned} m_z(t) &= \mu_0 \left[\theta(-t') \int |A(\omega)|^2 d\omega + \theta(t') \int |A(\omega)|^2 R(\omega) d\omega + \right. \\ &\quad \left. + \theta(t' \operatorname{sgn}(\hbar\omega - U_0)) \int |A(\omega)|^2 \frac{\hbar\omega - U_0}{|\hbar\omega - U_0|} T(\omega) d\omega \right] \cos \theta. \quad (9.38) \end{aligned}$$

Получившееся выражение практически совпадает с выражением, определяющим закон сохранения заряда, поэтому, не повторяя вышеприведенного обсуждения, можно сразу отметить, что проекция магнитного момента на направление рассеивающего поля остается неизменной как в случае $\Delta E > U_0$, так и в случае $0 \leq \Delta E \leq U_0 - 2m_0c^2$:

$$m_z^{(0)} = m_z^{(r)} + m_z^{(t)}.$$

Перейдем теперь к рассмотрению z -проекции электрического момента. Используя (9.33ж), получаем

$$d_z(t) = \mu_0 \left[\theta(t') \int |A(\omega)|^2 D_r(\omega) d\omega + \theta(t' \operatorname{sgn}(\hbar\omega - U_0)) \int |A(\omega)|^2 \frac{\hbar\omega - U_0}{|\hbar\omega - U_0|} D_t(\omega) d\omega \right], \quad (9.39)$$

где

$$D_r = \frac{i}{2} (r_1^* r_2 - r_1 r_2^*) = \frac{i}{2} \left[\frac{\sin^2 \pi s^* + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 - K_2)/2)}{\sin^2 \pi s^* + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2)} - \frac{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 - K_2)/2)}{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2)} \right], \quad (9.40)$$

$$D_t = \frac{iK_2}{2k_1} (t_1^* t_2 - t_1 t_2^*) = \frac{i}{2} \left[\frac{\operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2) - \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 - K_2)/2)}{\sin^2 \pi s^* + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2)} - \frac{\operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2) - \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 - K_2)/2)}{\sin^2 \pi s + \operatorname{sh}^2(\pi(k_1 + K_2)/2)} \right]. \quad (9.41)$$

В формуле (9.39), так же как и ранее, мы воспользовались асимптотическим видом волновых функций, поэтому в качестве моментов времени t_1 и t_2 мы выбираем моменты времени, в которые волновой пакет находится на значительном расстоянии от области скачка потенциала, т. е. $|t'_{1,2}| \gg \tau(0)$, где $t'_1 = t_1 - L/v_1 < 0$ и $t'_2 = t_2 - L/v_1 > 0$. В случае надбарьерного прохождения частицы, получаем

$$d_z(t_1) = 0, \quad d_z(t_2) = \mu_0 \int |A(\omega)|^2 (D_r(\omega) + D_t(\omega)) d\omega,$$

а в случае $0 \leq \Delta E \leq U_0 - 2m_0c^2$:

$$d_z(t_1) = -\mu_0 \int |A(\omega)|^2 D_t(\omega) d\omega, \quad d_z(t_2) = \mu_0 \int |A(\omega)|^2 D_r(\omega) d\omega.$$

Из формул (9.40)–(9.41) следует, что

$$D_r(\omega) + D_t(\omega) = 0. \quad (9.42)$$

Таким образом, проекция электрического момента на направление рассеивающего электрического поля остается неизменной как в случае надбарьерного прохождения частицы, так и в случае рождения зеркальных частиц.

На рис. 9.5, *и, з* проиллюстрированы энергетические зависимости проекции вектора электрического момента на направление рассеивающего электрического поля отраженной (*з*) и «прошедшей» (*з*) частиц. Мы взяли в кавычки термин «прошедшая волна», поскольку волновой пакет в области $z > 0$ может отвечать состоянию как прошедшей (при $\Delta E > U_0$), так и зеркальной частицы (при $U_0 > 2m_0c^2$ и $0 \leq \Delta E \leq U_0 - 2m_0c^2$).

Замечания

1. Магнитный момент отраженной частицы совпадает по знаку с магнитным моментом как зеркальной, так и прошедшей частицы, а электрический момент противоположен по знаку электрическому моменту как зеркальной, так и прошедшей частицы.

2. Зеркальная частица характеризуется либо противоположным знаком заряда, либо противоположным знаком нормы волновой функции по отношению к указанным характеристикам падающей частицы.

9.6. Зависимость коэффициентов отражения и прохождения от состояния падающей частицы

Выше мы рассмотрели случай, когда падающая частица находится в положительном квартионном состоянии. Пусть теперь частица находится в суперпозиционном состоянии, описываемом общей волновой функцией (9.14). Подставляя в (9.14) общие решения (9.11) и учитывая симметричные свойства (9.20), для отраженной волны получаем

$$\begin{aligned}
 N_r &= (C_1 C_3^* + C_2^* C_4) r_1 r_2^* + (C_1^* C_3 + C_2 C_4^*) r_1^* r_2, \\
 M_x^{(r)} &= (C_1 C_4^* + C_1^* C_4) |r_1|^2 + (C_2 C_3^* + C_2^* C_3) |r_2|^2, \\
 M_y^{(r)} &= i(C_1 C_4^* - C_1^* C_4) |r_1|^2 - i(C_2 C_3^* - C_2^* C_3) |r_2|^2, \\
 M_z^{(r)} &= (C_1 C_3^* - C_2^* C_4) r_1 r_2^* + (C_1^* C_3 - C_2 C_4^*) r_1^* r_2, \\
 P_x^{(r)} &= -i(C_1 C_4^* - C_1^* C_4) |r_1|^2 - i(C_2 C_3^* - C_2^* C_3) |r_2|^2, \\
 P_y^{(r)} &= (C_1 C_4^* + C_1^* C_4) |r_1|^2 - (C_2 C_3^* + C_2^* C_3) |r_2|^2, \\
 P_z^{(r)} &= -i(C_1 C_3^* + C_2^* C_4) r_1 r_2^* + i(C_1^* C_3 + C_2 C_4^*) r_1^* r_2, \\
 \Gamma_r &= i(C_1 C_3^* - C_2^* C_4) r_1 r_2^* - i(C_1^* C_3 - C_2 C_4^*) r_1^* r_2.
 \end{aligned} \tag{9.43}$$

Отметим, что 4-векторы $M = (\mathbf{M}, \Gamma)$ и $P = (\mathbf{P}, N)$ для падающей волны получаются из формул (9.43) заменой $r_i \rightarrow 1$, а для прошедшей волны — заменой $r_i \rightarrow t_i$.

Полученные формулы наглядно демонстрируют симметричные свойства компонент 4-векторов M и P . Несложно видеть, что указанные 4-векторы ортогональны как для падающей, так и для отраженной и прошедшей волн. Действительно, из (9.43) получаем

$$M_\mu P_\mu = 0. \tag{9.44}$$

Величина 4-векторов M и P , компоненты которых определяются выражениями (9.43), одинакова и равна

$$M_\mu M_\mu = P_\mu P_\mu = 4 \left(|C_1|^2 |r_1|^2 + |C_2|^2 |r_2|^2 \right) \left(|C_3|^2 |r_2|^2 + |C_4|^2 |r_1|^2 \right).$$

При $r_i = 1$ полученное выражение совпадает с аналогичным выражением, полученным в разделе 7.6.2. Таким образом, 4-векторы M и P ортогональны не только в случае свободной частицы, но и при движении частицы во внешнем пространственно неоднородном стационарном поле, несмотря на то что величина указанных 4-векторов различна в различных пространственных областях.

Формулу (9.21) для коэффициента отражения в случае, когда падающая волна отвечает положительному квантовому состоянию, можно записать в следующем виде:

$$R_0 = \frac{1}{2} (r_1 r_2^* + r_1^* r_2) = |R_0| \cos \varphi_R,$$

где $\varphi_R = \text{Arg}(r_1 r_2^*)$. Введем для краткости следующие обозначения:

$$\begin{aligned} D_1 &= (C_1 C_3^* + C_2^* C_4) = |D_1| \exp(i\varphi_1), \\ D_2 &= (C_1 C_3^* - C_2^* C_4) = |D_2| \exp(i\varphi_2). \end{aligned}$$

Физический смысл величин D_1 и D_2 следует из вышеприведенного определения. Путем несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} |D_1| \cos \varphi_1 &= \frac{1}{2} \left(|A_1|^2 + |A_2|^2 - |B_1|^2 - |B_2|^2 \right) = \frac{N_0}{2}, \\ |D_1| \sin \varphi_1 &= -\frac{i}{2} [(A_1^* B_1 - A_1 B_1^*) - (A_2^* B_2 - A_2 B_2^*)] = \frac{P_z^{(0)}}{2}, \\ |D_2| \cos \varphi_2 &= \frac{1}{2} \left[(|A_1|^2 - |B_1|^2) - (|A_2|^2 - |B_2|^2) \right] = \frac{M_z^{(0)}}{2}, \\ |D_2| \sin \varphi_2 &= -\frac{i}{2} [(A_1^* B_1 - A_1 B_1^*) + (A_2^* B_2 - A_2 B_2^*)] = -\frac{\Gamma_0}{2}, \end{aligned}$$

где A_i и B_i — постоянные коэффициенты в волновой функции (9.17). С учетом обсуждения, приведенного выше, можно сказать, что величина $\sum_{n=1}^2 (|A_n|^2 - |B_n|^2)$ — разность числа положительных и отрицательных квантов в падающей волне. Тогда формулы (9.43) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} N_r &= 2 |D_1| |R_0| \cos(\varphi_R + \varphi_1), \\ P_z^{(r)} &= 2 |D_1| |R_0| \sin(\varphi_R + \varphi_1), \\ M_z^{(r)} &= 2 |D_2| |R_0| \cos(\varphi_R + \varphi_2), \\ \Gamma_r &= -2 |D_2| |R_0| \sin(\varphi_R + \varphi_2). \end{aligned} \tag{9.45}$$

Учитывая вышеприведенные соотношения, формулы (9.45) можно переписать в виде

$$\begin{aligned}
 N_r &= |R_0| (N_0 \cos \varphi_R - P_z^{(0)} \sin \varphi_R), \\
 P_z^{(r)} &= |R_0| (P_z^{(0)} \cos \varphi_R + N_0 \sin \varphi_R), \\
 \Gamma_r &= |R_0| (\Gamma_0 \cos \varphi_R - M_z^{(0)} \sin \varphi_R), \\
 M_z^{(r)} &= |R_0| (M_z^{(0)} \cos \varphi_R + \Gamma_0 \sin \varphi_R).
 \end{aligned}
 \tag{9.46}$$

Как видно, временная и продольная пространственная компоненты 4-векторов M_μ и P_μ в отраженном поле связаны с аналогичными компонентами указанных 4-векторов в падающей волне преобразованием вращения на угол φ_R . Напомним, что направление оси z совпадает с направлением внешнего электрического поля. Поскольку поперечные компоненты векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} согласно (9.43) зависят лишь от модуля амплитудных коэффициентов отражения r_i , то преобразование этих компонент от угла φ_R не зависит. Эти компоненты испытывают лишь преобразования растяжения и сжатия с параметрами $|r_1|^2$ и $|r_2|^2$:

$$\begin{aligned}
 M_x^{(r)} + P_y^{(r)} &= (M_x^{(0)} + P_y^{(0)}) |r_1|^2, & M_x^{(r)} - P_y^{(r)} &= (M_x^{(0)} - P_y^{(0)}) |r_2|^2, \\
 M_y^{(r)} - P_x^{(r)} &= (M_y^{(0)} - P_x^{(0)}) |r_1|^2, & M_y^{(r)} + P_x^{(r)} &= (M_y^{(0)} + P_x^{(0)}) |r_2|^2.
 \end{aligned}$$

Из полученных формул следует, что, вне зависимости от величины продольной проекции вектора электрической поляризации падающей волны, продольная проекция вектора электрической поляризации отраженной волны не равна нулю. Равенство нулю продольной компоненты вектора магнитной поляризации падающей волны и величины Γ_0 приводит к их нулевым значениям и в отраженной волне. Равенство нулю поперечных компонент векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} в падающей волне означает их равенство нулю и в отраженном поле.

В предыдущем разделе мы показали, что если падающая волна находится в положительном квартионном состоянии, то поперечные компоненты векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} взаимно перпендикулярны. Для падающей волны, являющейся суперпозицией положительных и отрицательных квартионов, получаем

$$\begin{aligned}
 M_x^{(r)} P_x^{(r)} + M_y^{(r)} P_y^{(r)} &= - (M_z^{(r)} P_z^{(r)} + N_r \Gamma_r) = \\
 &= 4 |D_1| |D_2| |R_0|^2 \sin(\varphi_2 - \varphi_1).
 \end{aligned}$$

Учитывая вышеприведенные соотношения, несложно видеть, что поперечные компоненты векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} в отраженном поле взаимно перпендикулярны, если падающая волна соответствует положительному ($B_i = 0$) или отрицательному ($A_i = 0$) квартионным состояниям.

Коэффициент отражения для суперпозиционного состояния падающей частицы имеет вид

$$R = \frac{N_r}{N_0} = |R_0| \frac{\cos(\varphi_R + \varphi_1)}{\cos \varphi_1}.$$

Несложно видеть, что коэффициент отражения зависит от состояния падающей частицы. Из (9.46) получаем

$$R = \frac{N_r}{N_0} = |R_0| \left(\cos \varphi_R - \frac{P_z^{(0)}}{N_0} \sin \varphi_R \right) = R_0 - P_z^{(0)} \frac{|R_0| \sin \varphi_R}{N_0}.$$

Отметим, что согласно формулам (9.12)

$$r_1 r_2^* = \frac{\Gamma\left(1 + s_1 - i \frac{k_1 + k_2}{2}\right) \Gamma\left(-s_1 - i \frac{k_1 + k_2}{2}\right) \Gamma\left(1 + s_1 + i \frac{k_1 + k_2^*}{2}\right) \Gamma\left(-s_1 + i \frac{k_1 + k_2^*}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + s_1 + i \frac{k_1 - k_2}{2}\right) \Gamma\left(-s_1 + i \frac{k_1 - k_2}{2}\right) \Gamma\left(1 + s_1 - i \frac{k_1 - k_2^*}{2}\right) \Gamma\left(-s_1 - i \frac{k_1 - k_2^*}{2}\right)}.$$

Следовательно, в области полного отражения, когда k_2 является чисто мнимой величиной, получаем: $\varphi_R = 0$, поэтому в области полного отражения $R = R_0 = 1$. Однако вне области полного отражения величина коэффициента отражения зависит от проекции вектора электрической поляризации падающей волны. При заданной энергии налетающей частицы коэффициент отражения тем больше, чем меньше величина проекции вектора электрической поляризации падающей частицы на направление рассеивающего электрического поля. В вышеприведенных рассуждениях мы полагали, что $\varphi_R > 0$. В общем случае φ_R может быть, в принципе, и отрицательным, хотя бы потому что величина φ_R зависит от величины параметра $\gamma_e = \mu_0/\mu_B$. В иллюстративных целях на рис. 9.6 мы показали зависимости $\Delta R = R_0 - R$ и $\Delta T = T_0 - T$ от энергии налетающей частицы в случае, когда магнетон частицы имеет следующие значения: $\mu_0/\mu_B = 1,0011596521883$ (а) и (б), 2 (в) и (г), 3 (д) и (е). Несложно видеть, что на указанные зависимости существенно влияет величина магнитного момента частицы. Отметим также, что кривая (рис. 9.6, а) совпадает с кривой на рис. 9.4, б, показывающей зависимость продольной компоненты вектора электрической поляризации отраженной частицы.

Таким образом, формулы (9.46) наглядно демонстрируют зависимость коэффициентов отражения и прохождения от состояния падающей частицы. Потенциальная ступенька дискриминирует частицы по величине проекции вектора электрической поляризации на направление рассеивающего электрического поля: в прошедшей волне доминируют состояния с положительной проекцией вектора электрической поляризации на направление электрического поля, а в отраженной волне — с отрицательной проекцией.

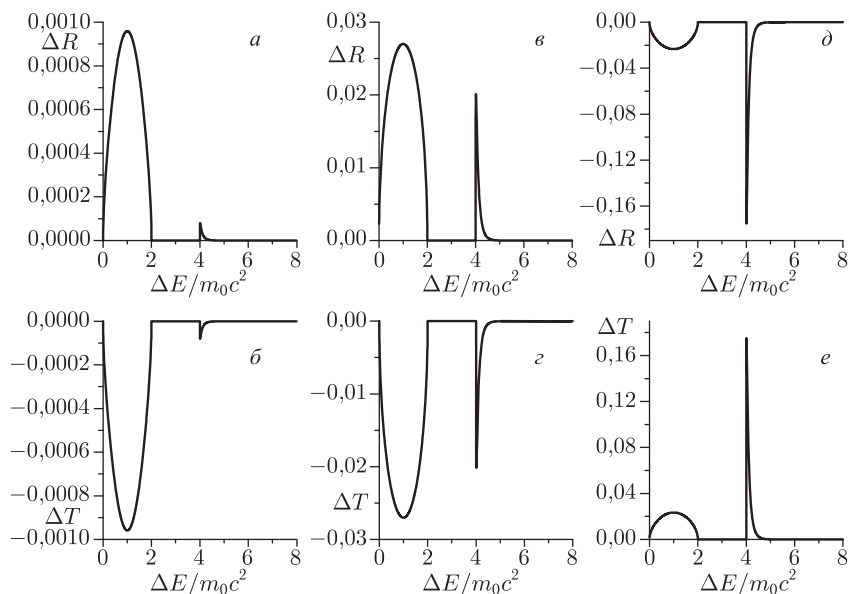


Рис. 9.6. Энергетические зависимости разности коэффициентов отражения $\Delta R = R_0 - R$ и прохождения $\Delta T = T_0 - T$ для падающей частицы, находящейся в состоянии с ненулевым верхним спинором ($\mathbf{P}_0 = 0$) и в суперпозиционном состоянии ($\mathbf{P}_0 \neq 0$) в случае, когда величина магнетона частицы имеет следующие значения: $\mu_0/\mu_B = 1,0011596521883$ (а и б), 2 (в и г), 3 (д и е)

9.7. Выводы

Анализ, проведенный в настоящей главе, позволяет сделать следующие основные выводы.

1. Движение релятивистской спинорной частицы в постоянном пространственно неоднородном электрическом поле может сопровождаться возбуждением зеркальных частиц. Необходимые условия возбуждения зеркальных состояний состоят в следующем: а) высота потенциального барьера U_0 должна превышать удвоенную массу покоя частицы: $U_0 > 2m_0c^2$, поскольку только в этом случае нижняя ветвь энергетической поверхности $E^{(-)} = U - \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$ (для которой групповая скорость движения частицы отрицательна, $\partial E/\partial p < 0$) может принимать положительные значения (см. рис. 9.2); б) пространственная ширина области изменения потенциальной энергии $l = \beta^{-1}$ не должна существенно превышать комптоновскую длину волны частицы $\lambda_C = 2\pi/k_C$ (где $k_C = m_0c/\hbar$), в противном случае амплитуда волновой функции частицы в области за скачком потенциала становится экспоненциально малой.

2. В случае спинорного материального поля заряд зеркальной частицы может как совпадать с зарядом налетающей частицы, так и быть противоположным ему. Следовательно, зеркальная частица может быть как зеркальной частицей, так и зеркальной античастицей. В то время как в случае скалярного материального поля заряд зеркальной частицы всегда противоположен заряду налетающей частицы.

3. Задание компонент 4-векторов $M_\mu = (\mathbf{M}, \Gamma)$ и $P_\mu = (\mathbf{P}, N)$ в падающей волне позволяет однозначно определить компоненты указанных 4-векторов в рассеянном поле. При этом указанные два 4-вектора взаимно ортогональны в любой точке пространства как в случае движения свободной частицы, так и при движении частицы в стационарном пространственно неоднородном электрическом поле.

4. При рассеянии частицы электрическим полем энергетические коэффициенты отражения и прохождения не зависят от направления вектора магнитной поляризации падающей частицы. Однако они существенно зависят от величины и направления вектора электрической поляризации падающей частицы \mathbf{P}_0 . Отклонения коэффициентов отражения ΔR и прохождения ΔT от их значений для случая $\mathbf{P}_0 = 0$ прямо пропорциональны величине продольной проекции вектора \mathbf{P}_0 .

5. Вне области полного отражения состояние частиц, рассеянных пространственно неоднородным электрическим полем, характеризуется ненулевой величиной компоненты вектора электрической поляризации, параллельной вектору напряженности рассеивающего электрического поля при произвольном направлении вектора магнитной поляризации падающей частицы. Если направление вектора магнитной поляризации налетающей частицы не совпадает с направлением вектора напряженности рассеивающего электрического поля, то, наряду с продольными компонентами векторов электрической и магнитной поляризации, состояние рассеянных частиц характеризуется ненулевыми значениями поперечных взаимно перпендикулярных компонент векторов электрической и магнитной поляризации. При этом направление поперечной компоненты вектора магнитной поляризации совпадает с направлением вектора поперечной компоненты магнитной поляризации падающей частицы (см. вставки на рис. 9.4).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НЕЙТРАЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ СО СТАЦИОНАРНЫМИ ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНЫМИ МАГНИТНЫМИ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ

Настоящая глава посвящена изложению теории взаимодействия нейтральных частиц с электромагнитным полем. Как мы уже отмечали выше, действие (7.1) состоит из двух частей. Одна часть связана с трансляционным движением частицы и зависит от двух материальных параметров — массы частицы m_0 , определяющей инерционные свойства частицы, и заряда q_0 , определяющего характер взаимодействия частицы как целого с электромагнитным полем. Вторая часть действия (7.1) связана с движением частицы по внутренним степеням свободы и зависит от третьего материального параметра частицы — магнетона μ_0 . Именно появление третьей независимой материальной константы в действии (7.1) дает возможность последовательного описания взаимодействия нейтральных частиц с электромагнитным полем.

Нейтроннография уже давно является эффективным методом исследования структуры вещества. Однако интерпретация наблюдаемых явлений и точный расчет сечений рассеяния нейтронов в веществе затруднены ввиду отсутствия последовательной теории взаимодействия нейтронов с электромагнитными полями. Существующие методы описания базируются на использовании полуэмпирических теорий, основанных на введении модельных потенциалов взаимодействия (см., например, [45]). Возникающие сложности интерпретации можно проиллюстрировать уже на примере ларморовской прецессии. Изменение частоты прецессии спина в магнитном поле дает возможность прецизионного определения величины магнитного момента частиц. Однако поскольку компоненты оператора спина, перпендикулярные направлению его движения, не коммутируют с гамильтонианом уравнения Дирака для свободной частицы, то спин свободного нейтрона также должен прецессировать. Это находится в противоречии с экспериментальными данными. Напротив, как мы уже отмечали выше, спин свободной частицы, описываемой уравнением (7.2), может иметь произвольное направление, а магнитный момент свободной частицы является сохраняющейся величиной.

Более чем полувекovou историю имеют эксперименты по измерению электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона и других частиц [4]. Эти эксперименты не позволяют определить ЭДМ нейтрона, а устанавливают лишь верхнюю границу его возможной величины.

Следует отметить, что все эксперименты по поиску ЭДМ проводятся по схеме, предложенной Парселлом и Рамсеем [46], в основе которой лежит предположение о том, что оператор дипольного момента пропорционален оператору спина, т. е. $\mathbf{d} = d\Sigma$. В свою очередь в рамках теории, основанной на действии (7.1), в качестве оператора электрического момента частицы фигурирует оператор $\boldsymbol{\pi} = -i\mu_0\boldsymbol{\alpha}$. Как мы увидим в настоящей главе, в этом случае схема Парселла–Рамсея является непригодной для измерения ЭДМ нейтрона, что наглядно объясняет неудачи экспериментов по измерению ЭДМ.

В настоящей главе мы проанализируем ряд одномерных задач рассеяния нейтрона стационарными магнитными и электрическими полями. Эти задачи имеют строгие аналитические решения и обладают простотой, что позволяет дать наглядную интерпретацию тем качественно новым чертам в поведении частиц, которые появляются лишь в рамках теории, основанной на использовании волнового уравнения (7.2). Например, задача рассеяния нейтрона постоянным магнитным полем позволяет не только рассчитать энергетические зависимости коэффициентов отражения для падающих нейтронов различной поляризации, но и приводит к важному выводу о зависимости массы покоя нейтрона от величины напряженности магнитного поля. Задача о рассеянии нейтрона постоянным электрическим полем даст дополнительную информацию о внутреннем строении частиц с полужелым спином. Результаты, полученные в предыдущей главе, показывают, что частица, находящаяся в положительном квартионном состоянии, попадая в область ненулевого электрического поля, переходит в суперпозиционное состояние положительных и отрицательных квартионов, т. е. состояние частицы становится суперпозицией чистых состояний частицы и античастицы. Это и является причиной появления электрического дипольного момента заряженных частиц. В настоящей главе мы покажем, что аналогичная ситуация возникает и при попадании нейтрона в область ненулевого электрического поля. В заключительных разделах главы будет предложена схема измерения ЭДМ нейтрона и определены оптимальные условия проведения соответствующих экспериментов.

10.1. Одномерные задачи рассеяния

Единственной одномерной задачей о движении заряженной частицы во внешних стационарных полях является рассмотренная в предыдущей главе задача о движении частицы в стационарном электрическом поле. Уже задача о движении заряженной частицы в постоянном магнитном поле является двумерной, поэтому мы перейдем к ее анализу в следующей главе. Однако класс одномерных задач для нейтральной частицы с полужелым спином гораздо шире и включает задачи о движении как в пространственно неоднородном электрическом, так и в магнитном полях.

Действительно, пусть нейтральная частица взаимодействует со стационарными внешними полями, имеющими вид

$$A_\mu(x) = A_\mu(\mathbf{r}). \quad (10.1)$$

Подставляя в уравнение (6.2) волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar), \quad (10.2)$$

получаем

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{2m_0 c^2} + \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (10.3)$$

В случае когда $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(z)$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(z)$, оператор уравнения (10.3) коммутирует с оператором проекции импульса на плоскость, перпендикулярную оси z , следовательно, проекция импульса $\mathbf{p}_\perp = (p_x, p_y, 0)$ сохраняется, поэтому $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(z) \exp(i\mathbf{p}_\perp \mathbf{r}/\hbar)$, и нам остается определить лишь функцию $\Psi(z)$.

В этом случае уравнение (10.3) принимает вид

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 + \frac{2m_0 \mu_0}{\hbar^2} (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}(z) - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}(z)) \right] \Psi(z) = 0, \quad (10.4)$$

где κ — величина волнового вектора частицы, находящейся в области нулевой амплитуды полей:

$$\kappa = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}. \quad (10.5)$$

Далее мы будем рассматривать по отдельности задачи взаимодействия частицы с магнитным полем, с электрическим полем и суперпозицией магнитного и электрического полей следующего вида:

$$\mathbf{B}(z) = \mathbf{B}_0 f(z), \quad \mathbf{E}(z) = \mathbf{E}_0 f(z),$$

т. е. в последнем случае будем полагать, что пространственные профили полей совпадают.

В соответствии с рассмотрением, проведенным в предыдущей главе, общее положительно частотное решение уравнения (10.4) имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n g_n(z), \quad (10.6)$$

где C_n — константы, ψ_n — биспиноры, являющиеся собственными решениями спиновой части уравнения (10.4) и отвечающие собственным значениям

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 - i \mathbf{E}_0)^2}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 + i \mathbf{E}_0)^2}.$$

Пространственные волновые функции $g_n(z)$ удовлетворяют уравнениям

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 + \frac{2m_0\mu_0}{\hbar^2} \lambda_n f(z) \right] g_n(z) = 0. \quad (10.7)$$

В одномерных задачах рассеяния удобно полагать, что пространственные профили полей имеют следующую асимптотическую форму:

$$f(z) = \begin{cases} 0, & z \rightarrow -\infty, \\ f_0, & z \rightarrow \infty, \end{cases}$$

где f_0 , в частности, может быть равным нулю. В этом случае интересующие нас решения уравнений (10.7) должны иметь следующую асимптотическую форму при $z = \pm\infty$:

$$g_n(z) = \begin{cases} \exp(i\kappa z) + r_n \exp(-i\kappa z), & z \rightarrow -\infty, \\ t_n \exp(i\nu_n z), & z \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (10.8)$$

где

$$\nu_n^2 = \kappa^2 + \lambda_n \frac{2m_0\mu_0 f_0}{\hbar^2}.$$

Каждая из пространственных волновых функций $g_n(z)$ нормируется на единичный поток падающих частиц, а коэффициенты r_n и t_n являются парциальными амплитудами отраженных и прошедших волн. Коэффициенты r_n , t_n , а также волновой вектор ν_n зависят от энергии налетающей частицы, напряженности полей и их пространственной конфигурации.

Так же как и ранее, энергетические коэффициенты отражения R и прохождения T определяются из условия равенства нулю суммарного потока частиц через бесконечно удаленные поверхности и имеют вид

$$\begin{aligned} R &= \frac{\mathbf{e}_{-z} (\nabla \bar{\Psi}_r \cdot \Psi_r - \bar{\Psi}_r \cdot \nabla \Psi_r) \Big|_{z \rightarrow -\infty}}{\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_0 \cdot \Psi_0 - \bar{\Psi}_0 \cdot \nabla \Psi_0) \Big|_{z \rightarrow -\infty}}, \\ T &= \frac{\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_t \cdot \Psi_t - \bar{\Psi}_t \cdot \nabla \Psi_t) \Big|_{z \rightarrow \infty}}{\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_0 \cdot \Psi_0 - \bar{\Psi}_0 \cdot \nabla \Psi_0) \Big|_{z \rightarrow -\infty}}, \end{aligned} \quad (10.9)$$

где в соответствии с (10.6) и (10.8) волновые функции падающей Ψ_0 , отраженной Ψ_r и прошедшей Ψ_t частиц имеют следующий асимптотический вид:

$$\begin{aligned} \Psi_0(z) &= \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n \exp(i\kappa z), & \Psi_r(z) &= \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n r_n \exp(-i\kappa z), \\ \Psi_t(z) &= \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n t_n \exp(i\nu_n z). \end{aligned}$$

10.2. Взаимодействие нейтральной частицы со стационарным магнитным полем

Настоящий раздел посвящен анализу взаимодействия нейтронов с магнитным полем. В первой части мы рассмотрим задачу рассеяния нейтрона магнитным полем, занимающим полупространство. Решение этой задачи иллюстрирует механизм поляризации нейтрона при отражении от намагниченных сред, позволяет рассчитать частоту прецессии спина в магнитном поле и объясняет причину изменения массы покоя частиц при их взаимодействии с магнитным полем.

Во второй части мы рассмотрим рассеяние нейтрона пространственно ограниченным магнитным полем. Интерес к этой задаче обусловлен тем, что при рассеянии нейтронов атомарными и молекулярными газами, жидкостями, твердыми телами важную роль играет внутриатомное магнитное поле, обусловленное, например, конечностью величины орбитального углового момента или спина атомных электронов и ядра. Поскольку пространственные профили внутриатомного электрического и магнитного полей отличаются друг от друга, мы можем проанализировать вклад каждого из них в общее сечение рассеяния по отдельности. Одномерная задача рассеяния является, конечно же, модельной по отношению к указанному процессу, но тем не менее она позволяет получить представление о параметрах, влияющих на этот процесс, и их требуемых значениях. Мы также рассчитаем спектр связанных состояний нейтрона в одномерной магнитной ловушке.

10.2.1. Взаимодействие нейтрона с магнитным полем. Как мы отмечали в гл. 8, в случае когда частица взаимодействует с магнитным полем, уравнения для положительных и отрицательных квартионных состояний становятся не зависящими друг от друга. Следовательно, если падающая частица находилась в одном из указанных состояний, то она остается в этом состоянии и в области ненулевого магнитного поля. Это связано с тем, что оператор γ_4 коммутирует с оператором уравнения (7.2) в случае, когда $\mathbf{E} = 0$. Собственными функциями оператора γ_4 , удовлетворяющими уравнению

$$\gamma_4 \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda$$

и отвечающими собственным значениям $\lambda = \pm 1$, являются следующие биспиноры:

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ I \end{pmatrix},$$

норма которых имеет вид: $N_\lambda = \bar{\psi}_\lambda \psi_\lambda = \lambda$. Так как оператор γ_4 коммутирует с оператором уравнения (7.2) в случае $\mathbf{E} = 0$, то его собственные функции являются одновременно и решениями уравнения (7.2) для частицы, взаимодействующей с пространственно неоднородным магнитным полем. Следует отметить, что при произвольном унитарном преобразовании волновых функций $\Psi' = U\Psi$ операторы γ_μ принимают

вид: $\gamma'_\mu = U\gamma_\mu U^{-1}$, при этом $\gamma'_4\psi'_\lambda = \lambda\psi'_\lambda$, т. е. норма собственных волновых функций оператора γ_4 в произвольном представлении матриц γ_μ остается неизменной. Следовательно, все сказанное выше относится не только к стандартному, но и к произвольному представлению матриц γ_μ .

Рассмотрим задачу о взаимодействии нейтрона с постоянным пространственно неоднородным магнитным полем следующего вида:

$$\mathbf{B}(z) = \frac{\mathbf{B}_0}{1 + \exp(-\beta z)},$$

т. е. напряженность магнитного поля плавно нарастает от нулевого значения при $z \rightarrow -\infty$ к конечному значению B_0 при $z \rightarrow \infty$. Характерный пространственный размер области, где напряженность магнитного поля меняется от нулевого значения до стационарного, определяется выражением $l = 1/\beta$.

Уравнение (10.7) для пространственных волновых функций $g_n(z)$ принимает в этом случае следующий вид:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 + \frac{2m_0\mu_0 B_0}{\hbar^2} \frac{\lambda_n}{1 + \exp(-\beta z)} \right) g_n(z) = 0, \quad (10.10)$$

где κ определяется выражением (10.5), а собственные значения λ_n имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \pm 1, \quad \lambda_{3,4} = \pm 1. \quad (10.11)$$

Для удобства сравнения с результатами предыдущей главы введем новые коэффициенты разложения волновой функции (10.6), как это было сделано в разделе 9.2:

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_1 + B_1), & C_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_2 + B_2), \\ C_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_1 - B_1), & C_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_2 - B_2). \end{aligned} \quad (10.12)$$

В этом случае полная волновая функция принимает вид

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \frac{1}{2} A_1 \begin{pmatrix} w^{(+)}(g_1 + g_3) \\ w^{(+)}(g_1 - g_3) \end{pmatrix} + \frac{1}{2} A_2 \begin{pmatrix} w^{(-)}(g_2 + g_4) \\ w^{(-)}(g_2 - g_4) \end{pmatrix} + \\ &+ \frac{1}{2} B_1 \begin{pmatrix} w^{(+)}(g_1 - g_3) \\ w^{(+)}(g_1 + g_3) \end{pmatrix} + \frac{1}{2} B_2 \begin{pmatrix} w^{(-)}(g_2 - g_4) \\ w^{(-)}(g_2 + g_4) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Учитывая симметричные свойства собственных значений (10.11), несложно видеть, что для частицы, взаимодействующей с внешним магнитным полем, имеют место следующие соотношения между компонентами пространственных волновых функций:

$$g_1(z) = g_3(z), \quad g_2(z) = g_4(z).$$

Таким образом, полная волновая функция частицы, взаимодействующей только с магнитным полем, принимает вид

$$\Psi(z) = A_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} g_1(z) + A_2 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix} g_2(z) + B_1 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix} g_1(z) + B_2 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(-)} \end{pmatrix} g_2(z). \quad (10.13)$$

Отсюда видно, что если нижний спинор волновой функции частицы равен нулю в какой-либо точке пространства (например, при $z = -\infty$), то он остается равным нулю и во всех остальных точках пространства. В этом состоит основное отличие задачи о движении частицы в постоянном магнитном поле от задачи движения частицы в постоянном электрическом поле, где, как мы видели в предыдущей главе, симметричные свойства собственных значений приводят к тому, что $g_1 = g_4$ и $g_2 = g_3$. Поэтому, несмотря на то что волновая функция падающей частицы имеет вид (9.17) с коэффициентами B_i , равными нулю, волновая функция прошедшей частицы имеет вид (9.27) с ненулевым нижним спинором.

Следовательно, при движении частицы в постоянном магнитном поле, не ограничивая общности, мы можем положить

$$\Psi(z) = \sum_{\sigma=\pm 1} A_\sigma \psi_\sigma g_\sigma(z), \quad (10.14)$$

где

$$\psi_\sigma = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix}$$

и спиноры $w^{(\sigma)}$ являются собственными функциями уравнения

$$(\mathbf{n}_B \boldsymbol{\sigma}) w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}.$$

Решения для падающей частицы, волновая функция которой имеет отрицательную норму, получаются действием оператора γ_5 на волновую функцию (10.14).

Подставляя (10.14) в (10.10), получаем

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 \right) g_\sigma(z) = \frac{2m_0 |\mu_0| B_0}{\hbar^2} \frac{\sigma}{1 + \exp(-\beta z)} g_\sigma(z), \quad (10.15)$$

где мы для определенности положили, что падающая частица является нейтроном, поэтому магнитный момент является отрицательным. Введем новую переменную

$$\xi = -\exp(-\beta z),$$

тогда уравнение (10.15) принимает вид

$$\xi^2(1 - \xi)g''_\sigma + \xi(1 - \xi)g'_\sigma + \kappa^2(1 - \xi)g_\sigma - a\sigma g_\sigma = 0, \quad (10.16)$$

где

$$k^2 = \frac{\kappa^2}{\beta^2}, \quad a = \frac{2m_0 |\mu_0| B_0}{\hbar^2 \beta^2}.$$

Общее решение уравнения (10.16) имеет вид

$$g_\sigma(\xi) = C_1(-\xi)^{-i\nu_\sigma} F(-ik - i\nu_\sigma, ik - i\nu_\sigma, 1 - 2i\nu_\sigma, \xi) + \\ + C_2(-\xi)^{i\nu_\sigma} F(-ik + i\nu_\sigma, ik + i\nu_\sigma, 1 + 2i\nu_\sigma, \xi), \quad (10.17)$$

где $C_{1,2}$ — константы и мы ввели обозначение

$$\nu_\sigma = \sqrt{k^2 - a\sigma}. \quad (10.18)$$

Асимптотика решения (10.17) при $z \rightarrow \infty$ имеет вид

$$g_\sigma(z)|_{z \rightarrow \infty} = C_1 \exp(i\nu_\sigma \beta z) + C_2 \exp(-i\nu_\sigma \beta z).$$

Следовательно, асимптотической форме (10.8) отвечает лишь решение при коэффициенте C_1 в (10.17). Асимптотика этого решения при $z \rightarrow -\infty$ имеет вид

$$g_\sigma(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \exp(-ik\beta z) \frac{\Gamma(1 - i2\nu_\sigma)\Gamma(i2k)}{\Gamma(ik - i\nu_\sigma)\Gamma(1 + ik - i\nu_\sigma)} + \\ + \exp(ik\beta z) \frac{\Gamma(1 - i2\nu_\sigma)\Gamma(-i2k)}{\Gamma(-ik - i\nu_\sigma)\Gamma(1 - ik - i\nu_\sigma)}.$$

Нормируя решение на единичный поток падающих частиц,

$$g_\sigma(z) = \begin{cases} \exp(ikz) + r_\sigma \exp(-ikz), & z \rightarrow -\infty, \\ t_\sigma \exp(i\nu_\sigma \beta z), & z \rightarrow \infty, \end{cases}$$

для амплитудных коэффициентов отражения r_σ и прохождения t_σ получаем

$$r_\sigma = \frac{\Gamma(-ik - i\nu_\sigma)\Gamma(1 - ik - i\nu_\sigma)\Gamma(i2k)}{\Gamma(ik - i\nu_\sigma)\Gamma(1 + ik - i\nu_\sigma)\Gamma(-i2k)}, \quad (10.19)$$

$$t_\sigma = \frac{\Gamma(-ik - i\nu_\sigma)\Gamma(1 - ik - i\nu_\sigma)}{\Gamma(1 - i2\nu_\sigma)\Gamma(-i2k)}. \quad (10.20)$$

По аналогии с рассмотрением, использованным в предыдущей главе, положим

$$A_\sigma = A\alpha_\sigma, \quad (10.21)$$

где

$$|\alpha_{+1}|^2 + |\alpha_{-1}|^2 = 1.$$

Для энергетических коэффициентов отражения и прохождения, определяемых формулами (10.9), получаем

$$R = \sum_\sigma |\alpha_\sigma|^2 R_\sigma, \quad T = \sum_\sigma |\alpha_\sigma|^2 T_\sigma, \quad (10.22)$$

где R_σ и T_σ определяются выражениями

$$\begin{aligned} R_\sigma &= |r_\sigma|^2 = \left(\frac{\operatorname{sh}(\pi(k - \operatorname{Re}(\nu_\sigma)))}{\operatorname{sh}(\pi(k + \operatorname{Re}(\nu_\sigma)))} \right)^2, \\ T_\sigma &= \frac{\operatorname{Re}(\nu_\sigma)}{k} |t_\sigma|^2 = \frac{\operatorname{sh}(2\pi \operatorname{Re}(\nu_\sigma)) \operatorname{sh}(2\pi k)}{\operatorname{sh}^2(\pi(k + \operatorname{Re}(\nu_\sigma)))}. \end{aligned} \quad (10.23)$$

Несложно видеть, что

$$R_\sigma + T_\sigma = 1.$$

Следовательно, и

$$R + T = 1.$$

Замечания и выводы

1. Основные отличия коэффициентов (10.22) от соответствующих коэффициентов для случая взаимодействия заряженной частицы с электрическим полем состоят в том, что коэффициенты отражения и прохождения (10.22) явно зависят от ориентации спина (т. е. вектора магнитной поляризации) падающей частицы.

Как видно из формулы (10.18), величина $k_0 = \sqrt{a}$ определяет пороговое значение величины безразмерного волнового вектора, соответствующее области полного отражения падающих нейтронов с поляризацией $\sigma = +1$. Действительно, $\operatorname{Re}(\nu_+) = 0$ при $k < k_0$ и $\operatorname{Re}(\nu_+) > 0$ при $k > k_0$. Это вполне естественно, поскольку энергия нейтрона в области, занятой полем, в этом случае возрастает по сравнению с энергией налетающей частицы, входящей из области, где $B_0 = 0$. Напомним, что магнетон μ_0 для нейтрона отрицателен, поэтому магнитный момент нейтрона направлен в этом случае против направления магнитного поля. Падающая частица с поляризацией $\sigma = -1$ испытывает заметное отражение лишь при $k \rightarrow 0$, поскольку $\operatorname{Re}(\nu_-) > 0$ при всех k . Коэффициенты отражения R_\pm и прохождения T_\pm как функции безразмерного волнового вектора k показаны на рис. 10.1. В качестве оси абсцисс на этом графике можно взять энергию налетающей частицы, однако в иллюстративных целях мы воспользовались параметром k/k_0 .

2. Из представленных графиков видно, что при $k \gg k_0$ амплитуды прошедших волн одинаковы для обоих состояний поляризации падающей частицы и равны единице. Вектор магнитной поляризации прошедшей частицы определяется в этом случае выражением

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_t &= \mu_0 \bar{\Psi}_t \boldsymbol{\Sigma} \Psi_t = \mathbf{e}_x \mu_0 (\alpha_{+1} \alpha_{-1}^* \exp[i(\nu_+ - \nu_-)z] + \\ &+ \alpha_{+1}^* \alpha_{-1} \exp[-i(\nu_+ - \nu_-)z]) + \mathbf{e}_y i \mu_0 (\alpha_{+1} \alpha_{-1}^* \exp[i(\nu_+ - \nu_-)z] - \\ &- \alpha_{+1}^* \alpha_{-1} \exp[-i(\nu_+ - \nu_-)z]) + \mathbf{e}_z \mu_0 (|\alpha_{+1}|^2 - |\alpha_{-1}|^2). \end{aligned}$$

Следовательно, если в начальном состоянии нейтрон поляризован вдоль направления магнитного поля, то направление спина по мере его распространения в магнитном поле не изменяется. Это и понятно, поскольку проекция спина Σ_z является в этом случае интегралом движения. Если проекция спина падающего нейтрона на плоскость,

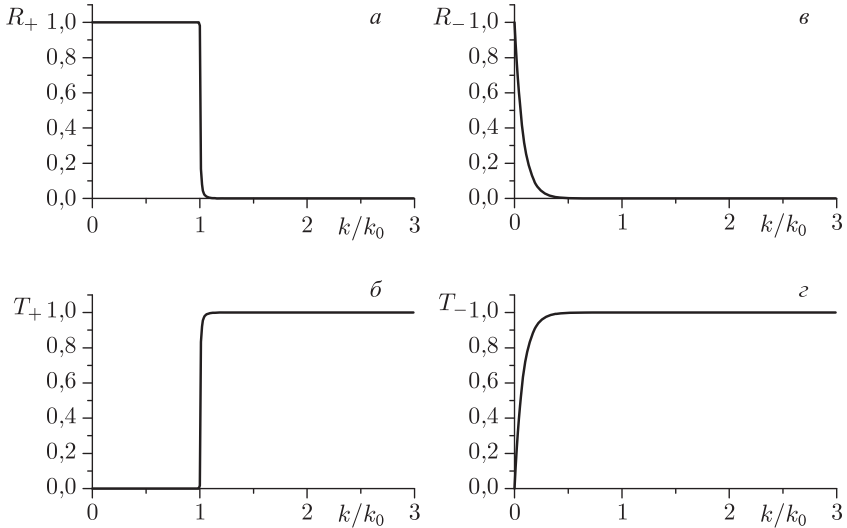


Рис. 10.1. Коэффициенты отражения R_σ и прохождения T_σ как функции величины нормированного волнового вектора падающей частицы k/k_0 , где $k_0 = \sqrt{a}$, для значения проекции спина $\sigma = 1$ (а), (б); -1 (в), (з)

перпендикулярную направлению магнитного поля, отлична от нуля, то спин прецессирует вокруг направления магнитного поля. Пространственная частота прецессии спина определяется выражением

$$\Delta\nu = \nu_+ - \nu_- = \sqrt{k^2 + a} - \sqrt{k^2 - a}. \quad (10.24)$$

При $k \gg k_0$ размерное значение пространственной частоты прецессии спина принимает вид

$$\Delta\nu = \Delta\nu_0\beta \approx \frac{2|\mu_0|B_0}{\hbar v},$$

где $v = p/m_0 = \hbar k/m_0$ — скорость частицы.

3. Важным для понимания специфики свойств частиц, подчиняющихся уравнению (7.2), является следующий вывод.

Дисперсионное соотношение (10.18), определяющее зависимость волнового вектора частицы от ее энергии в области постоянного магнитного поля, в размерных единицах имеет вид

$$\nu(E) = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4 - 2m_0 c^2 |\mu_0| B_0 \sigma}}{\hbar c}.$$

Отсюда для гиперплоскости состояний, определяющей зависимость энергии от импульса частицы $p = \hbar\nu$, получаем

$$E_\sigma^{(\pm)} = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + 2m_0 c^2 |\mu_0| B_0 \sigma + p^2 c^2}. \quad (10.25)$$

Как мы отмечали выше, величина запрещенной зоны для свободной частицы определяется энергетическим расстоянием между гиперповерхностями зон положительно и отрицательно частотных решений и равна удвоенной массе покоя частицы: $\Delta E = 2m_0c^2$. Как видно из последней формулы, в области ненулевого магнитного поля каждая из зон состояний свободной частицы расщепляется на две подзоны, отвечающие частицам, поляризованным в направлении магнитного поля или в противоположном ему. Таким образом, масса покоя частицы в области ненулевого магнитного поля, определяющая ширину запрещенной зоны состояний

$$\Delta E_\sigma = (E_\sigma^{(+)} - E_\sigma^{(-)})|_{p=0} = 2m_\sigma c^2, \quad (10.26)$$

зависит от состояния поляризации частицы и определяется выражением

$$m_\sigma c^2 = \sqrt{m_0^2 c^4 + 2m_0 c^2 |\mu_0| B_0 \sigma}. \quad (10.27)$$

В частности, при $|\mu_0| B_0 \ll m_0 c^2$ получаем

$$m_{\sigma=\pm 1} c^2 = m_0 c^2 \pm |\mu_0| B_0.$$

Соответствующая графическая интерпретация представлена на рис. 10.2.

Как видно, величина расщепления определяется энергией взаимодействия магнитного момента частицы с магнитным полем, и поэтому изменение массы должно быть наиболее заметным для легких частиц.

4. Падающая частица, поляризованная в направлении вектора напряженности магнитного поля или в противоположном ему, возбуждает состояние, отвечающее одной из подзон зоны положительно частотных решений. В свою очередь падающая частица, состояние поляризации которой не совпадает с направлением магнитного поля, возбуждает состояния, относящиеся к двум подзонам (точки t_+ и t_- на рис. 10.2), поэтому прецессия спина в магнитном поле является проявлением осцилляций массы покоя частицы.

10.2.2. Рассеяние нейтрона локализованным магнитным полем. Положим теперь, что напряженность магнитного поля имеет вид

$$\mathbf{B}(z) = \frac{\mathbf{B}_0}{\operatorname{ch}^2(\beta z)}. \quad (10.28)$$

Подставляя (10.28) в уравнение (10.7), получаем

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right) g_\sigma(z) = \frac{2m_0 |\mu_0| B_0}{\hbar^2 \beta^2} \frac{\sigma}{\operatorname{ch}^2(z)} g_\sigma(z). \quad (10.29)$$

В (10.29) мы ввели безразмерную переменную $z' = \beta z$ (штрихи здесь и далее для краткости опускаются), поэтому в (10.29) фигурирует безразмерный волновой вектор

$$k = \kappa/\beta,$$

где κ по-прежнему определяется выражением (10.5).

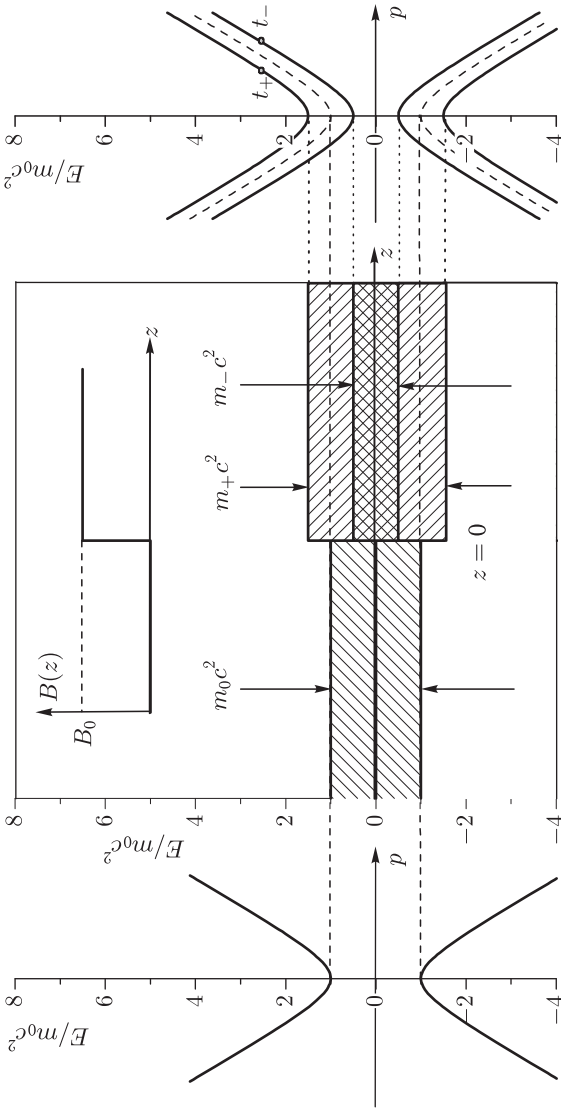


Рис. 10.2. Расщепление гиперплоскости состояний в магнитном поле на две подзоны, отвечающие различным значениям $\sigma = \pm 1$. В центре — пространственные профили магнитного поля и запрещенной зоны состояний. Слева — сечение гиперплоскости состояний свободной частицы. Справа — сечение гиперплоскости состояний в области ненулевого магнитного поля. Как видно, ширина запрещенной зоны состояний различна для частиц, поляризованных в направлении магнитного поля или в противоположном ему, что свидетельствует о зависимости массы покоя частицы от величины напряженности магнитного поля

Введением новой функции

$$g_\sigma(z) = (\operatorname{ch} z)^{-ik} f_\sigma(z)$$

и новой переменной

$$\eta = \frac{1}{1 + \exp(2z)}$$

уравнение (10.29) может быть приведено к уравнению для гипергеометрических функций следующего вида:

$$\eta(1-\eta)f''_\sigma(\eta) + (1+ik)(1-2\eta)f'_\sigma(\eta) - ik(1+ik)f_\sigma(\eta) = a\sigma f_\sigma(\eta), \quad (10.30)$$

где

$$a = \frac{2m_0|\mu_0|B_0}{\hbar^2\beta^2}. \quad (10.31)$$

Общее решение уравнения (10.30) имеет вид

$$f_\sigma(\eta) = C_1 F(1+ik+s_\sigma, ik-s_\sigma, 1+ik, \eta) + C_2 \eta^{-ik} F(1+s_\sigma, -s_\sigma, 1-ik, \eta),$$

где $C_{1,2}$ — константы,

$$s_\sigma = \frac{1}{2}(\sqrt{1-4a\sigma} - 1). \quad (10.32)$$

При $z \rightarrow \infty$ функция $g_\sigma(z)$ имеет следующую асимптотику:

$$g_\sigma(z)|_{z \rightarrow \infty} = C_1 \exp(-ikz) + C_2 \exp(ikz),$$

следовательно, асимптотической форме (10.8) удовлетворяет решение при коэффициенте C_2 . Итак,

$$g_\sigma(z) = \exp(ikz) F\left(1+s_\sigma, -s_\sigma, 1-ik, \frac{1}{1+\exp(2z)}\right). \quad (10.33)$$

Асимптотика этого решения при $z \rightarrow -\infty$ имеет вид

$$g_\sigma(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \frac{\Gamma(1-ik)\Gamma(-ik)}{\Gamma(-ik-s_\sigma)\Gamma(1-ik+s_\sigma)} \exp(ikz) + \frac{\Gamma(1-ik)\Gamma(ik)}{\Gamma(1+s_\sigma)\Gamma(-s_\sigma)} \exp(-ikz). \quad (10.34)$$

Используя (10.33), (10.34), для амплитудных коэффициентов отражения r_σ и прохождения t_σ получаем

$$r_\sigma = \frac{\Gamma(-ik-s_\sigma)\Gamma(1-ik+s_\sigma)\Gamma(ik)}{\Gamma(1+s_\sigma)\Gamma(-s_\sigma)\Gamma(-ik)}, \quad (10.35)$$

$$t_\sigma = \frac{\Gamma(-ik-s_\sigma)\Gamma(1-ik+s_\sigma)}{\Gamma(1-ik)\Gamma(-ik)}.$$

Таким образом, если падающая частица находится в положительном квартионном состоянии, то решение задачи (10.4) о движении нейтрона в магнитном поле с профилем (10.28) имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{\sigma=\pm 1} A_{\sigma} \psi_{\sigma} g_{\sigma}(z),$$

где $g_{\sigma}(z)$ определяется выражением

$$g_{\sigma}(z) = t_{\sigma} F \left(1 + s_{\sigma}, -s_{\sigma}, 1 - ik, \frac{1}{1 + \exp(2z)} \right) \exp(ikz).$$

Используя обозначения (10.21), для энергетических коэффициентов отражения и прохождения вновь получаем

$$R = \sum_{\sigma} |\alpha_{\sigma}|^2 R_{\sigma}, \quad T = \sum_{\sigma} |\alpha_{\sigma}|^2 T_{\sigma},$$

где парциальные коэффициенты отражения R_{σ} и прохождения T_{σ} теперь имеют вид

$$\begin{aligned} R_{\sigma} &= |r_{\sigma}|^2 = \frac{\sin(\pi s_{\sigma}) \sin(\pi s_{\sigma}^*)}{\operatorname{sh}^2(\pi k) + \sin(\pi s_{\sigma}) \sin(\pi s_{\sigma}^*)}, \\ T_{\sigma} &= |t_{\sigma}|^2 = \frac{\operatorname{sh}^2(\pi k)}{\operatorname{sh}^2(\pi k) + \sin(\pi s_{\sigma}) \sin(\pi s_{\sigma}^*)}. \end{aligned} \quad (10.36)$$

В (10.36) мы учли, что при $a > 1/4$ параметр s_{σ} для $\sigma = +1$ становится комплексным. Действительно, в этом случае s_{+} имеет вид

$$s_{\sigma=+1} = \frac{1}{2} (-1 + i\sqrt{4a - 1}).$$

Из формул (10.36) несложно видеть, что

$$R_{\sigma} + T_{\sigma} = 1.$$

Как видно, энергетическая граница области отражения определяется условием $k_0 = |s|$. Параметр a , как следует из (10.31), определяет отношение энергии взаимодействия магнитного момента с полем $|\mu_0| B_0$ к кинетической энергии частицы $\hbar^2 \beta^2 / 2m_0$, локализованной в области ненулевого магнитного поля. При $a \ll 1/4$ получаем

$$\Delta E_0 = E_0 - m_0 c^2 \approx \mu_0 B_0 \cdot a.$$

Таким образом, при малых a пороговое значение энергии определяется произведением энергии магнитодипольного взаимодействия и параметра a . Разность коэффициентов отражения для двух состояний поляризации $\sigma = \pm 1$ падающего нейтрона отлична от нуля в области $\Delta E_{+} - \Delta E_{-} = 2 |\mu_0| B_0 \cdot a$. При $a \gg 1/4$ получаем: $\Delta E_{+} \approx |\mu_0| B_0$. На рис. 10.3 показана зависимость $\Delta R = R_{+} - R_{-}$ от величины волнового вектора k для значения a : 1/40 (а), 1/20 (б), 1/8 (в), 1/4 (г), 1 (д), 2 (е), 4 (ж), 8 (з). Несложно видеть, что с ростом напряженности

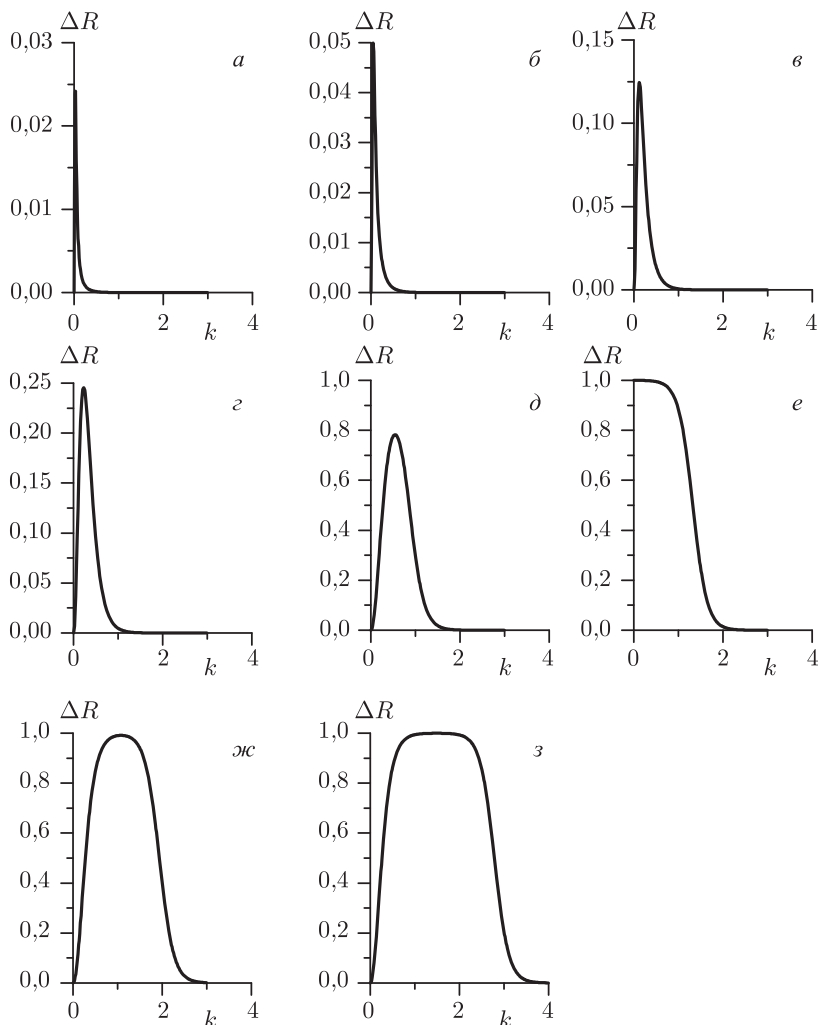


Рис. 10.3. Разность коэффициентов отражения нейтронов, поляризованных в направлении рассеивающего магнитного поля или в противоположном ему, для следующих значений параметра s : $1/40$ (а), $1/20$ (б), $1/8$ (в), $1/4$ (г), 1 (д), 2 (е), 4 (ж), 8 (з)

магнитного поля происходит расширение области, где нейтроны с начальной поляризацией $\sigma = +1$ отражаются, а нейтроны с поляризацией $\sigma = -1$ проходят через барьер. Из формул (10.36) следует, что, когда параметр s равен целому числу, коэффициент отражения обращается в нуль. Это условие может выполняться лишь для поляризации падающего нейтрона $\sigma = -1$, т. е. когда магнитный момент нейтрона

совпадает с направлением магнитного поля. В частности, при $a = 2$ получаем: $s_- = 1$, как видно из рис. 10.3, *e*, в этом случае $\Delta R = R_+$.

10.2.3. Зависимость коэффициентов отражения и прохождения от состояния падающей частицы. Рассмотрим теперь рассеяние частицы, находящейся в произвольном состоянии с волновой функцией (10.13). Выпишем выражения для компонент 4-векторов M_μ и P_μ :

$$\begin{aligned}
 N_r &= \left(|A_1|^2 - |B_1|^2 \right) |r_1|^2 + \left(|A_2|^2 - |B_2|^2 \right) |r_2|^2, \\
 M_x^{(r)} &= (A_1 A_2^* - B_1 B_2^*) r_1 r_2^* + (A_1^* A_2 - B_1^* B_2) r_1^* r_2, \\
 M_y^{(r)} &= i (A_1 A_2^* - B_1 B_2^*) r_1 r_2^* - i (A_1^* A_2 - B_1^* B_2) r_1^* r_2, \\
 M_z^{(r)} &= \left(|A_1|^2 - |B_1|^2 \right) |r_1|^2 - \left(|A_2|^2 - |B_2|^2 \right) |r_2|^2, \\
 P_x^{(r)} &= i [(A_1 B_2^* - A_2^* B_1) r_1 r_2^* - (A_1^* B_2 - A_2 B_1^*) r_1^* r_2], \\
 P_y^{(r)} &= - [(A_1 B_2^* - A_2^* B_1) r_1 r_2^* + (A_1^* B_2 - A_2 B_1^*) r_1^* r_2], \\
 P_z^{(r)} &= i \left[(A_1 B_1^* - A_1^* B_1) |r_1|^2 - (A_2 B_2^* - A_2^* B_2) |r_2|^2 \right], \\
 \Gamma_r &= -i \left[(A_1 B_1^* - A_1^* B_1) |r_1|^2 + (A_2 B_2^* - A_2^* B_2) |r_2|^2 \right],
 \end{aligned} \tag{10.37}$$

где $r_1 = r_{+1}$ и $r_2 = r_{-1}$. Полученные выражения показывают, что симметричные свойства компонент 4-векторов M_μ и P_μ при взаимодействии частицы с магнитным полем отличаются от аналогичных свойств, характерных для взаимодействия частицы с электрическим полем. Однако наряду с отличиями есть и общность, проявляющаяся в том, что указанные 4-векторы по-прежнему остаются ортогональными. Действительно, из вышеприведенных формул получаем

$$M_\mu P_\mu = 0.$$

Величина 4-векторов определяется в этом случае выражением

$$\begin{aligned}
 M_\mu M_\mu &= P_\mu P_\mu = 4 \left(|C_1|^2 |r_1|^2 + |C_2|^2 |r_2|^2 \right) \left(|C_3|^2 |r_1|^2 + |C_4|^2 |r_2|^2 \right) = \\
 &= \left[(A_1 + B_1)^* (A_1 + B_1) |r_1|^2 + (A_2 + B_2)^* (A_2 + B_2) |r_2|^2 \right] \times \\
 &\quad \times \left[(A_1 - B_1)^* (A_1 - B_1) |r_1|^2 + (A_2 - B_2)^* (A_2 - B_2) |r_2|^2 \right],
 \end{aligned}$$

где коэффициенты C_i связаны с коэффициентами A_i и B_i соотношениями (10.12).

Различия в симметричных свойствах состоят в следующем. В противоположность случаю рассеяния электрическим полем, в случае рассеяния магнитным полем поперечные компоненты векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} в отраженной и падающей волнах связаны теперь преобразованиями вращения, а продольные пространственные и временные компоненты 4-векторов M_μ и P_μ связаны преобразованиями растяжения и сжатия

с параметрами $|r_1|^2$ и $|r_2|^2$. По аналогии с рассмотрением, проведенным в разделе 9.6, введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} R &= r_1 r_2^* = |R| \exp(i\varphi_R), \\ D_3 &= A_1 A_2^* - B_1 B_2^* = |D_3| \exp(i\varphi_3), \\ D_4 &= A_1 B_2^* - A_2^* B_1 = |D_4| \exp(i\varphi_4). \end{aligned}$$

Используя введенные обозначения, получаем

$$\begin{aligned} M_x^{(r)} &= 2 |D_3| |R| \cos(\varphi_R + \varphi_3), \\ M_y^{(r)} &= -2 |D_3| |R| \sin(\varphi_R + \varphi_3), \\ P_x^{(r)} &= -2 |D_4| |R| \sin(\varphi_R + \varphi_4), \\ P_y^{(r)} &= -2 |D_4| |R| \cos(\varphi_R + \varphi_4). \end{aligned}$$

Учитывая введенные выше определения, полученные соотношения можно переписать в виде

$$\begin{aligned} M_x^{(r)} &= |R| (M_x^{(0)} \cos \varphi_R + M_y^{(0)} \sin \varphi_R), \\ M_y^{(r)} &= |R| (M_y^{(0)} \cos \varphi_R - M_x^{(0)} \sin \varphi_R), \\ P_x^{(r)} &= |R| (P_x^{(0)} \cos \varphi_R + P_y^{(0)} \sin \varphi_R), \\ P_y^{(r)} &= |R| (P_y^{(0)} \cos \varphi_R - P_x^{(0)} \sin \varphi_R). \end{aligned} \quad (10.38a)$$

Отметим, что, в отличие от случая рассеяния электрическим полем, коэффициент R не является коэффициентом отражения.

Для преобразования продольных пространственных и временных компонент 4-векторов $M_\mu = (\mathbf{M}, \Gamma)$ и $P_\mu = (\mathbf{P}, N)$ получаем

$$\begin{aligned} N_r + M_z^{(r)} &= (N_0 + M_z^{(0)}) |r_1|^2, & N_r - M_z^{(r)} &= (N_0 - M_z^{(0)}) |r_2|^2, \\ \Gamma_r - P_z^{(r)} &= (\Gamma_0 - P_z^{(0)}) |r_1|^2, & \Gamma_r + P_z^{(r)} &= (\Gamma_0 + P_z^{(0)}) |r_2|^2. \end{aligned} \quad (10.38b)$$

Замечания и выводы

1. Если состояние падающей частицы определяется параметрами $\mathbf{M}_\perp^{(0)} = 0$, $\mathbf{P}^{(0)} = 0$ и $\Gamma_0 = 0$, то эти параметры состояния остаются равными нулю и в рассеянном поле.

2. Отличие от нуля поперечных компонент вектора магнитной поляризации падающей волны не приводит к появлению (индуцированию) поперечных компонент вектора электрической поляризации в рассеянном поле, как это имело место в случае рассеяния частицы электрическим полем.

3. Вне зависимости от величины продольной компоненты вектора магнитной поляризации падающей волны продольная компонента вектора магнитной поляризации рассеянных волн отлична от нуля. В частности, при $M_z^{(0)} = 0$ получаем

$$M_z^{(r)} = \frac{N_0}{2} (|r_1|^2 - |r_2|^2). \quad (10.39)$$

Как видно из полученного выражения, появление ненулевой продольной компоненты вектора магнитной поляризации связано с тем, что коэффициенты отражения для состояний $\sigma = \pm 1$ различны.

10.2.4. Связанные состояния нейтрона в магнитном поле. Как мы отмечали выше, рассеяние нейтронов с поляризацией $\sigma = +1$ происходит за счет того, что в этом случае ширина запрещенной зоны растет с ростом напряженности поля. С другой стороны, для нейтронов с поляризацией $\sigma = -1$ ширина запрещенной зоны уменьшается с ростом напряженности поля, поэтому для таких нейтронов образуется потенциальная яма в области, занятой полем, и они могут оказаться в связанном состоянии. Энергия связанных состояний нейтрона меньше массы покоя свободной частицы, поэтому

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c \beta} = i \frac{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}}{\hbar c \beta} = i\varepsilon. \quad (10.40)$$

Используя преобразование гипергеометрических функций:

$$F(a, b, c, z) = (1 - z)^{c-a-b} F(c - a, c - b, c, z),$$

из (10.33) получаем

$$g_\sigma(z) = \left(\frac{1}{\exp(z) + \exp(-z)} \right)^\varepsilon \times F\left(\varepsilon - s_\sigma, 1 + \varepsilon + s_\sigma, 1 + \varepsilon, \frac{1}{1 + \exp(2z)}\right). \quad (10.41)$$

Волновая функция (10.41) обращается в нуль при $z \rightarrow \infty$, т.е. удовлетворяет граничным условиям для связанных состояний частицы. Для того чтобы волновая функция обращалась в нуль и при $z \rightarrow -\infty$, как следует из асимптотики (10.34), должны выполняться следующие условия:

$$\varepsilon - s_\sigma = -n, \quad (10.42)$$

где n — целое неотрицательное число. Учитывая, что $\varepsilon > 0$, мы видим, что число связанных уровней конечно, поскольку должно выполняться условие

$$n < s_\sigma.$$

Поскольку s_+ при $a > 0$ отрицательно, то последнее условие может выполняться лишь при $\sigma = -1$. Таким образом, нейтроны со спином, направленным против направления магнитного поля (а следовательно, с магнитным моментом, ориентированным по направлению магнитного поля), образуют связанные состояния. Подставляя (10.40) в (10.42), для энергии связанных состояний получаем

$$E_n = \sqrt{m_0^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \beta^2 (s_- - n)^2}. \quad (10.43)$$

В частности, когда глубина потенциальной ямы $\Delta m_{\sigma=-1}c^2 = m_0c^2 - m_{\sigma=-1}c^2$ много меньше массы покоя свободного нейтрона m_0c^2 , для энергии связанных состояний получаем

$$\Delta E_n = m_0c^2 - E_n \approx \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_0} (s_- - n)^2.$$

Таким образом, при заданной величине напряженности магнитного поля возникает конечное число связанных состояний.

10.2.5. Выводы. Подытожим вышесказанное и перечислим особенности взаимодействия частиц с постоянными пространственно неоднородными магнитными полями.

1. Движение частицы в стационарном пространственно неоднородном магнитном поле не приводит к индуцированию вектора электрической поляризации состояния частицы.

2. Масса покоя частицы, движущейся в однородном магнитном поле, зависит от величины напряженности магнитного поля, поскольку гиперплоскость состояний свободной частицы $E(\mathbf{p})$ с шириной запрещенной зоны $\Delta E = 2m_0c^2$ разбивается на две гиперплоскости, $E_{\sigma=\pm 1}(\mathbf{p})$, соответствующие двум противоположным поляризациям спина вдоль направления магнитного поля, каждой из которых отвечает своя ширина запрещенной зоны

$$\Delta E_{\sigma} = 2m_{\sigma}c^2 = 2\sqrt{m_0^2c^4 + 2m_0c^2|\mu_0|B_0\sigma}.$$

Отражением указанных закономерностей является эффект прецессии спина нейтрона при его движении в однородном магнитном поле.

3. Зависимость массы покоя частицы от напряженности магнитного поля приводит к образованию связанных состояний частиц в пространственно ограниченном магнитном поле.

4. Энергетические коэффициенты отражения и прохождения существенно зависят от вектора магнитной поляризации падающей частицы, что может быть использовано для приготовления поляризованных состояний частиц. В свою очередь энергетические коэффициенты отражения и прохождения не зависят от вектора электрической поляризации налетающей частицы.

5. Как видно из проведенного анализа, направление магнитного поля в рассмотренных выше задачах является произвольным. Это обстоятельство обусловлено тем, что движение нейтральной частицы по внутренним степеням свободы не зависит от ее состояния по трансляционным степеням свободы. Следовательно, при упругом отражении нейтрона от идеальной границы раздела обе компоненты, $\sigma = \pm 1$, отражаются зеркально. В зависимости от угла падения (при фиксированной энергии частицы) меняется лишь соотношение между амплитудами указанных компонент в отраженном поле.

10.3. Взаимодействие нейтральной частицы со стационарным электрическим полем

Рассмотрим задачу о рассеянии нейтрона одномерным постоянным электрическим полем следующего вида: $\mathbf{E} = eE(z)$, где e — произвольный единичный вектор. Для ряда пространственных профилей напряженности электрического поля эта задача позволяет получать точные аналитические решения. Анализ указанной задачи представляет интерес с различных точек зрения. С одной стороны, в гл. 9 мы уже исследовали задачу о взаимодействии заряженной частицы с постоянным электрическим полем, поэтому появляется возможность определения общих и специфических черт процесса рассеяния нейтральных и заряженных частиц электрическим полем. С другой стороны, поскольку исследуемая задача является точно решаемой, то появляется возможность однозначной интерпретации механизма рассеяния нейтрона электрическим полем. Это придает несомненную эвристическую ценность указанному анализу, если учесть, в особенности, то обстоятельство, что механизм рассеяния нейтрона электрическим полем до сих пор однозначно не установлен [47–50].

Анализ указанной задачи можно провести с использованием общего формализма ортогональных биспиноров (квартионов), развитого в гл. 8. Как мы уже отмечали выше, общее положительно частотное решение имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n g_n(z),$$

где ортогональные биспиноры ψ_n в случае взаимодействия частицы с электрическим полем отвечают собственным значениям

$$\lambda_{1,2} = \mp i, \quad \lambda_{3,4} = \pm i.$$

Вводя новые постоянные коэффициенты

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_1 + B_1), & C_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_2 + B_2), \\ C_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_1 - B_1), & C_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (A_2 - B_2) \end{aligned} \quad (10.44)$$

и учитывая симметричные свойства собственных значений, общее решение можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \frac{A_1}{2} \begin{pmatrix} w^{(+)}(g_1 + g_2) \\ w^{(+)}(g_1 - g_2) \end{pmatrix} + \frac{A_2}{2} \begin{pmatrix} w^{(-)}(g_1 + g_2) \\ -w^{(-)}(g_1 - g_2) \end{pmatrix} + \\ &+ \frac{B_1}{2} \begin{pmatrix} w^{(+)}(g_1 - g_2) \\ w^{(+)}(g_1 + g_2) \end{pmatrix} + \frac{B_2}{2} \begin{pmatrix} -w^{(-)}(g_1 - g_2) \\ w^{(-)}(g_1 + g_2) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10.45)$$

Удобство использования коэффициентов (10.44) состоит в том, что, учитывая асимптотическую форму (10.8) пространственных волновых

функций $g_n(z)$, для амплитуды волновой функции падающей частицы получаем

$$\Psi_0 = A_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix} + B_1 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix} + B_2 \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (10.46)$$

т. е. коэффициенты A_i задают состояние падающей частицы, отвечающее положительным квартионным состояниям, а коэффициенты B_i — отрицательным.

Полагая $B_i = 0$, для нормы волновой функции получаем

$$N^{(e)}(z) = \overline{\Psi}(z)\Psi(z) = \frac{|A_1|^2 + |A_2|^2}{2} (g_1^*(z)g_2(z) + g_1(z)g_2^*(z)). \quad (10.47)$$

Таким образом, норма волновой функции падающей частицы является положительной:

$$N_0 = \overline{\Psi}_0\Psi_0 = |A_1|^2 + |A_2|^2.$$

Однако, как видно, $N^{(e)}(z)$ не является заведомо положительно определенной величиной, т. е. норма волновой функции рассеянных частиц зависит от конкретных условий задачи и, в принципе, может отличаться по знаку от нормы волновой функции падающих частиц. Это обстоятельство отличает задачу рассеяния частицы электрическим полем от задачи рассеяния частицы магнитным полем, когда согласно (10.13)

$$N^{(m)}(z) = |A_1|^2 |g_1(z)|^2 + |A_2|^2 |g_2(z)|^2 > 0.$$

Как следует из результатов предыдущего анализа, изменение нормы волновой функции может быть обусловлено как участием в процессе рассеяния состояний, относящихся к отрицательно частотной зоне (т. е. рождением зеркальных частиц), так и рождением античастиц. Однако подробнее на обсуждении этого вопроса мы остановимся в гл. 11.

10.3.1. Отражение нейтрона электрическим полем. Рассмотрим задачу рассеяния нейтрона одномерным электрическим полем:

$$\mathbf{E}(z) = \frac{\mathbf{E}_0}{\text{ch}^2(\beta z)}. \quad (10.48)$$

Уравнение (10.4) принимает в этом случае вид

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 \right) \Psi(z) = i \frac{2m_0\mu_0\alpha\mathbf{E}_0}{\hbar^2 \text{ch}^2(\beta z)} \Psi(z). \quad (10.49)$$

Ортогональные биспиноры, отвечающие собственным значениям

$$\lambda_{1,2} = \mp i, \quad \lambda_{3,4} = \pm i, \quad (10.50)$$

имеют в этом случае вид

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (10.51)$$

где спиноры $w^{(\sigma)}$ являются собственными функциями уравнения

$$(\mathbf{n}_E \boldsymbol{\sigma}) w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}$$

и $\mathbf{n}_E = \mathbf{E}_0/E_0$.

Подставляя в (10.51) в (10.49), для координатных волновых функций $g_n(z)$ получаем следующие уравнения:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 + \frac{2m_0\mu_0 E_0}{\hbar^2} \frac{\lambda_n}{\operatorname{ch}^2(\beta z)} \right) g_n(z) = 0. \quad (10.52)$$

Введением новой координаты

$$\xi = \operatorname{th}(\beta z)$$

и новой неизвестной функции

$$g_n(\xi) = (1 - \xi^2)^{-\frac{ik}{2}} p_n(\xi)$$

уравнение (10.52) может быть сведено к уравнению для гипергеометрических функций:

$$(1 - \xi^2) p_n'' - 2\xi(1 - ik)p_n' + (k^2 + ik + a_n) p_n = 0,$$

где

$$k = \frac{\kappa}{\beta}, \quad a_n = \lambda_n \frac{2m_0\mu_0 E_0}{\hbar^2 \beta^2}.$$

Таким образом, общее решение уравнения (10.52) имеет вид

$$\begin{aligned} g_n(z) &= A_1 (2 \operatorname{ch}(\beta z))^{ik} F(-ik - s_n, -ik + s_n + 1, 1 - ik, \eta) + \\ &+ A_2 \exp(-ikz) F(s_n + 1, -s_n, 1 + ik, \eta), \end{aligned} \quad (10.53)$$

где $A_{1,2}$ — постоянные коэффициенты,

$$s_n = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - 4a_n} - 1 \right), \quad \eta = \frac{1}{1 + \exp(2\beta z)}. \quad (10.54)$$

Асимптотическая форма решений уравнений (10.52) при $z \rightarrow \infty$ должна иметь вид: $g_n(z) \sim \exp(ikz)$. Этому условию удовлетворяет реше-

ние (10.53) с $A_2 = 0$. При $z \rightarrow -\infty$ эти решения имеют следующий асимптотический вид:

$$g_n(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \frac{\Gamma(1-ik)\Gamma(-ik)}{\Gamma(1-ik+s_n)\Gamma(-ik-s_n)} \exp(ikz) + \frac{\Gamma(1-ik)\Gamma(ik)}{\Gamma(1+s_n)\Gamma(-s_n)} \exp(-ikz). \quad (10.55)$$

Из полученных асимптотических выражений $g_n(z)$ для амплитудных коэффициентов отражения r_n и прохождения t_n получаем

$$r_n = \frac{\Gamma(1-ik+s_n)\Gamma(-ik-s_n)\Gamma(ik)}{\Gamma(1+s_n)\Gamma(-s_n)\Gamma(-ik)}, \quad (10.56)$$

$$t_n = \frac{\Gamma(1-ik+s_n)\Gamma(-ik-s_n)}{\Gamma(1-ik)\Gamma(-ik)}.$$

Таким образом, общее решение уравнения (10.49) имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n g_n(z), \quad (10.57)$$

где

$$g_n(z) = t_n (2 \operatorname{ch}(\beta z))^{ik} \times F\left(-ik-s_n, 1-ik+s_n, 1-ik, \frac{1}{1+\exp(2\beta z)}\right). \quad (10.58)$$

10.3.2. Коэффициенты отражения и прохождения. Симметричные свойства собственных значений (10.50) приводят к следующим соотношениям для коэффициентов s_n :

$$s_1 = s_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + i \frac{8m_0\mu_0 E_0}{\hbar^2 \beta^2}} - 1 \right) = s, \quad (10.59)$$

$$s_2 = s_3 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - i \frac{8m_0\mu_0 E_0}{\hbar^2 \beta^2}} - 1 \right) = s^*.$$

С учетом этих соотношений выражения для амплитудных коэффициентов отражения и прохождения можно записать в виде

$$r_1 = r_4 = r(k, s), \quad r_2 = r_3 = r(k, s^*),$$

$$t_1 = t_4 = t(k, s), \quad t_2 = t_3 = t(k, s^*).$$

Тогда выражения для энергетических коэффициентов отражения R и прохождения T , определяемых формулами (10.9), принимают вид

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{C_1^* C_3 + C_2 C_4^*}{C_1^* C_3 + C_2 C_4^* + C_1 C_3^* + C_2^* C_4} r^*(k, s) r(k, s^*) + \\
 &\quad + \frac{C_1 C_3^* + C_2^* C_4}{C_1^* C_3 + C_2 C_4^* + C_1 C_3^* + C_2^* C_4} r^*(k, s^*) r(k, s), \\
 T &= \frac{C_1^* C_3 + C_2 C_4^*}{C_1^* C_3 + C_2 C_4^* + C_1 C_3^* + C_2^* C_4} t^*(k, s) t(k, s^*) + \\
 &\quad + \frac{C_1 C_3^* + C_2^* C_4}{C_1^* C_3 + C_2 C_4^* + C_1 C_3^* + C_2^* C_4} t^*(k, s^*) t(k, s).
 \end{aligned} \tag{10.60}$$

Как мы отмечали выше, замена коэффициентов C_i на коэффициенты A_i и B_i , определяемые равенствами (10.44), позволяет выделить в волновой функции падающей частицы состояния с положительной ($B_i = 0$) и отрицательной ($A_i = 0$) нормой. Полагая $B_i = 0$ и

$$A_1 = A\alpha_+, \quad A_2 = A\alpha_-,$$

где

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1,$$

для волновой функции падающей частицы получаем

$$\Psi_0(z) = \sum_{\sigma=\pm 1} \alpha_\sigma \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ikz). \tag{10.61}$$

Используя формулы (10.56), для энергетических коэффициентов отражения R и прохождения T в этом случае имеем

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\pi s^*)}{\sin^2(\pi s^*) + \text{sh}^2(\pi k)} + \frac{\sin^2(\pi s)}{\sin^2(\pi s) + \text{sh}^2(\pi k)} \right], \\
 T &= \frac{1}{2} \left[\frac{\text{sh}^2(\pi k)}{\sin^2(\pi s^*) + \text{sh}^2(\pi k)} + \frac{\text{sh}^2(\pi k)}{\sin^2(\pi s) + \text{sh}^2(\pi k)} \right].
 \end{aligned} \tag{10.62}$$

Несложно видеть, что

$$R + T \equiv 1. \tag{10.63}$$

Замечания и выводы

Полученные формулы позволяют сделать ряд общих выводов о зависимости коэффициентов отражения и прохождения от состояния падающей частицы.

1. Как мы видели выше (см., например, раздел 9.4), коэффициенты α_\pm задают направление вектора магнитной поляризации падающей частицы, описываемой волновой функцией (10.61). Формулы (10.62) от коэффициентов α_σ не зависят. Следовательно, энергетические коэффициенты отражения и прохождения от состояния магнитной поляризации падающей частицы не зависят.

2. Из формул (10.62) следует, что граница области отражения определяется условием

$$\operatorname{sh}(\pi k_0) = |\sin(\pi s)|. \quad (10.64)$$

При $k \gg k_0$ коэффициент отражения стремится к нулю, а коэффициент прохождения — к единице.

3. Из последней формулы видно, что энергетическая граница области отражения ΔE_b определяется выражением

$$\Delta E_b = E - m_0 c^2 \approx \frac{1}{4} \left(\sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \beta^2}{4m_0} \right)^2 + (2\mu_0 E_0)^2} - \frac{\hbar^2 \beta^2}{4m_0} \right).$$

Таким образом, пороговая энергия отражения зависит от соотношения величин $\mu_0 E_0$ и $\hbar^2 \beta^2 / 2m_0$, имеющих размерность энергии. Первая из них определяет энергию взаимодействия электрического момента частицы с рассеивающим электрическим полем, а вторая равна кинетической энергии частицы, локализованной в области, занятой полем.

Для падающей частицы, находящейся в состоянии (10.61), волновые функции отраженной Ψ_r и прошедшей Ψ_t волн имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_r(z) &= \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma} \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} r_u \exp(-i\kappa z) \\ \sigma w^{(\sigma)} r_d \exp(-i\kappa z) \end{pmatrix}, \\ \Psi_t(z) &= \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma} \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} t_u \exp(i\kappa z) \\ \sigma w^{(\sigma)} t_d \exp(i\kappa z) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (10.65)$$

где

$$\begin{aligned} r_u &= \frac{r(k, s) + r(k, s^*)}{2}, & r_d &= \frac{r(k, s) - r(k, s^*)}{2}, \\ t_u &= \frac{t(k, s) + t(k, s^*)}{2}, & t_d &= \frac{t(k, s) - t(k, s^*)}{2}. \end{aligned} \quad (10.66)$$

На рис. 10.4 показаны зависимости чисел заполнения положительных и отрицательных квартионных состояний отраженной и прошедшей волн: $|r_u|^2$ (а), $|t_u|^2$ (б), $|r_d|^2$ (в), $|t_d|^2$ (г), а также энергетических коэффициентов отражения R (д) и прохождения T (е) от величины нормированного волнового вектора падающей частицы k/k_0 при значении параметра $a = 2$. Величина k_0 в этом случае равна $k_0 = 0,94$. Из рисунков видно, что в точке $k = k_0$ происходит резкое возрастание амплитуд положительных и отрицательных квартионных состояний $|r_{u,d}|^2$ и $|t_{u,d}|^2$, а коэффициент отражения R испытывает резкий спад. Следует отметить, что с ростом величины коэффициента a значения амплитуд квартионных состояний $|r_{u,d}|^2$ и $|t_{u,d}|^2$ в точке $k = k_0$ все более возрастают, а граница области отражения становится все более резкой.

10.3.3. Электрическая и магнитная поляризация нейтрона, рассеянного электрическим полем. Волновые функции позволили нам определить коэффициенты отражения и прохождения нейтрона через область, занятую электрическим полем (см. формулы (10.62)).

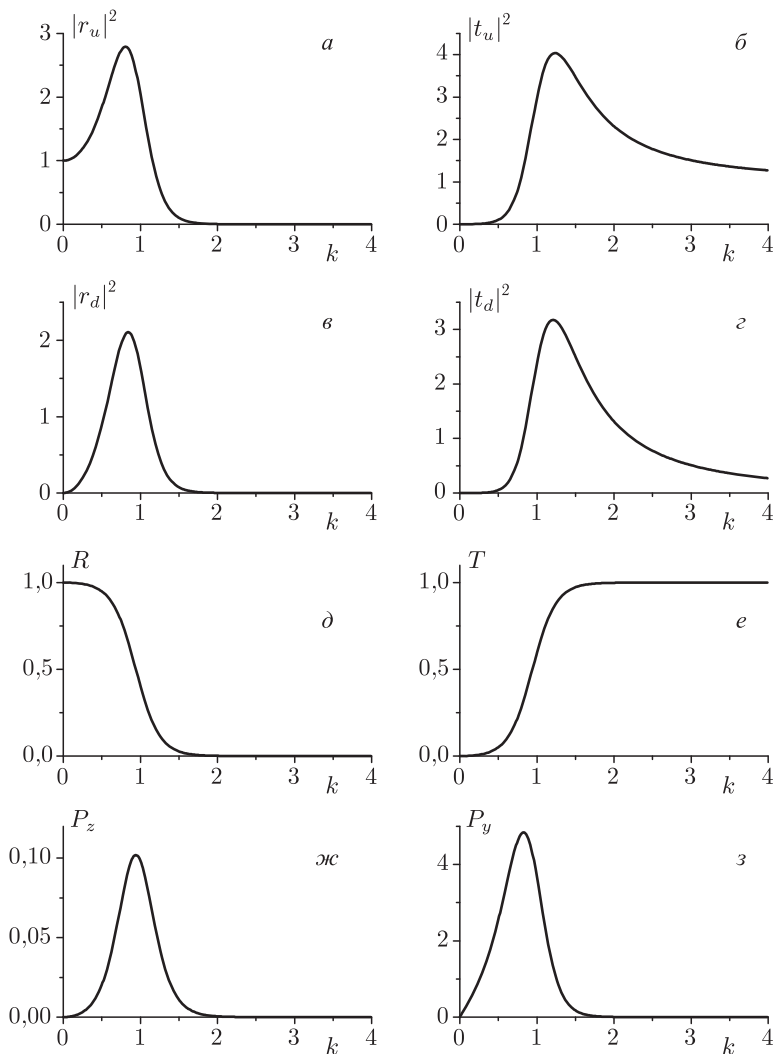


Рис. 10.4. Зависимости модулей квадратов амплитуд положительных и отрицательных квартионных состояний отраженной и прошедшей волн: $|r_u|^2$ (*a*), $|t_u|^2$ (*б*), $|r_d|^2$ (*в*), $|t_d|^2$ (*г*), энергетических коэффициентов отражения R (*д*) и прохождения T (*е*), а также компонент вектора электрической поляризации P_z и P_y (*ж* и *з* соответственно) от величины нормированного волнового вектора падающей частицы k/k_0 при значении параметра $a = 2$

Формула для коэффициента отражения (10.62) имеет вид, характерный для отражения от потенциального барьера. Коэффициент отражения равен единице, если энергия меньше пороговой, и быстро спадает

до нуля при энергии частицы, превышающей пороговую энергию. Из формулы (10.64) следует, что для широкого потенциального барьера ($\beta \rightarrow 0$) пороговая энергия отражения определяется величиной $\mu_0 E_0$, которая в соответствии с определением вектора электрической поляризации \mathbf{P} (см. формулу (7.21)) имеет физический смысл энергии взаимодействия вектора электрической поляризации частицы с электрическим полем: $-\int \mathbf{P} \mathbf{E} dV$ (см. (7.48)). Как мы отмечали выше, при движении частицы в однородном электрическом поле указанное взаимодействие может рассматриваться как электрическое дипольное взаимодействие, поскольку в этом случае $-\int \mathbf{P} \mathbf{E}_0 dV = -\mathbf{E}_0 \int \mathbf{P} dV$. Следует, однако, отметить, что в пространственно неоднородном электрическом поле взаимодействие $-\int \mathbf{P} \mathbf{E} dV$ не является электрическим дипольным. Например, если $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ имеет максимум в конечной области вблизи точки $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$, то разложение интеграла $-\int \mathbf{P} \mathbf{E} dV$ вблизи точки $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ включает все производные поля. Поэтому более точно указанное взаимодействие следует определять как взаимодействие индуцированного вектора электрической поляризации частицы с электрическим полем.

Исследуем динамику изменения векторов электрической и магнитной поляризации нейтрона,

$$\mathbf{M} = \mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi, \quad \mathbf{P} = -i\mu_0 \Psi \boldsymbol{\alpha} \Psi,$$

при его рассеянии электрическим полем.

Полагая, как и ранее,

$$\alpha_+ = \cos \frac{\theta}{2} \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\right), \quad \alpha_- = \sin \frac{\theta}{2} \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right), \quad (10.67)$$

из (10.61) получаем следующие выражения для векторов электрической и магнитной поляризации падающей частицы:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_0 &= 0, \\ \mathbf{M}_0 &= \mathbf{e}_z \cos \theta + \mathbf{e}_x \sin \theta \cos \varphi + \mathbf{e}_y \sin \theta \sin \varphi. \end{aligned} \quad (10.68)$$

Как мы уже неоднократно отмечали, вектор электрической поляризации частиц, находящихся в положительном квартионном состоянии, равен нулю. Напомним также, что углы θ и φ , вводимые согласно (10.67), определяют направление вектора магнитной поляризации. В соответствии с результатами гл. 8 направление оси z' системы координат, в которой задаются углы θ и φ , совпадает с направлением вектора напряженности электрического поля. Следует, однако, заметить, что поскольку уравнение для нейтральной частицы не содержит скалярного потенциала, то это направление может не совпадать с направлением оси z , фигурирующей в уравнении (10.49) и определяющей направление изменения величины напряженности поля.

Используя (10.67) и (10.65), для векторов электрической и магнитной поляризации отраженной волны получаем

$$\mathbf{P}_r = \mathbf{e}_z i (r_u r_d^* - r_u^* r_d) - \mathbf{e}_x (r_u r_d^* + r_u^* r_d) \sin \theta \sin \varphi + \\ + \mathbf{e}_y (r_u r_d^* + r_u^* r_d) \sin \theta \cos \varphi, \quad (10.69)$$

$$\mathbf{M}_r = \mathbf{e}_z R \cos \theta + \mathbf{e}_x \left(|r_u|^2 + |r_d|^2 \right) \sin \theta \cos \varphi + \\ + \mathbf{e}_y \left(|r_u|^2 + |r_d|^2 \right) \sin \theta \sin \varphi. \quad (10.70)$$

Для краткости мы опустили в формулах (10.68)–(10.70) величину магнитного момента μ_0 .

Отметим, что векторы \mathbf{P}_t и \mathbf{M}_t в прошедшей волне определяются формулами (10.69)–(10.70) с заменой коэффициентов r на t .

Замечания и выводы

Полученные формулы позволяют сделать ряд общих выводов об электрической и магнитной поляризации отраженной частицы.

1. Величина и направление векторов электрической и магнитной поляризации отраженной и прошедшей частиц в общем случае зависят от направления вектора магнитной поляризации падающей частицы и ее энергии, поскольку амплитуды положительных и отрицательных квартионных состояний $r_{u,d}$ и $t_{u,d}$, определенные равенствами (10.66), резко возрастают при приближении энергии частицы к границе области полного отражения.

2. Поскольку первое слагаемое в (10.69) не зависит от коэффициентов α_σ , то, вне зависимости от направления вектора \mathbf{M}_0 , в отраженном (прошедшем) поле возникает ненулевая проекция вектора электрической поляризации на направление вектора напряженности рассеивающего электрического поля. Как видно из формулы (10.69) и рис. 10.4, максимальную величину эта проекция принимает в области порогового значения энергии налетающей частицы.

3. Проекция вектора магнитной поляризации отраженного пучка на направление рассеивающего электрического поля определяется произведением соответствующей проекции вектора магнитной поляризации падающего пучка и коэффициента отражения: $M_{rz} = M_{0z} R$.

4. Если вектор магнитной поляризации падающей частицы ориентирован вдоль направления рассеивающего электрического поля ($\theta = 0, \pi$), то поперечные компоненты векторов \mathbf{P}_r и \mathbf{M}_r равны нулю.

5. Если направление вектора магнитной поляризации падающей частицы отличается от направления рассеивающего электрического поля ($0 < \theta < \pi$), то в отраженном поле, наряду с продольными компонентами P_z и M_z , ненулевыми являются две взаимно перпендикулярные поперечные компоненты векторов \mathbf{P}_r и \mathbf{M}_r , максимальные значения амплитуд которых определяются выражениями

$$P_\perp = (r_u r_d^* + r_u^* r_d), \quad M_\perp = \left(|r_u|^2 + |r_d|^2 \right).$$

Зависимость компонент P_z и P_y от величины параметра k для случая $a = 2$ показана на рис. 10.4, ж, з. Как видно из рисунков, наибольшие значения величины векторов продольной и поперечной электрической поляризации достигаются при энергии налетающей частицы, равной пороговой энергии отражения. Как видно из рис. 10.4, а, в, вектор электрической поляризации отличен от нуля в той области энергий падающей частицы, где волновая функция отраженной волны представляет собой суперпозицию положительных и отрицательных квартионных состояний:

$$\Psi_r(z) = \sum_{\sigma} \left[\begin{pmatrix} \alpha_{\sigma} w^{(\sigma)} r_u \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_{\sigma} \sigma w^{(\sigma)} r_d \end{pmatrix} \right] \exp(-ikz).$$

Отметим, что формулы (10.62) для энергетических коэффициентов отражения и преломления можно записать в следующем виде:

$$R = |r_u|^2 - |r_d|^2 = N_u^{(r)} - N_d^{(r)}, \quad T = |t_u|^2 - |t_d|^2 = N_u^{(t)} - N_d^{(t)}, \quad (10.71)$$

откуда получаем

$$R + T = N_u - N_d = 1, \quad (10.72)$$

где

$$N_u = N_u^{(r)} + N_u^{(t)}, \quad N_d = N_d^{(r)} + N_d^{(t)}.$$

Таким образом, закон сохранения (10.63) является следствием сохранения разности чисел заполнения положительных и отрицательных квартионных состояний в процессе рассеяния, несмотря на то что каждое из указанных чисел может значительно превышать единицу. Сохранение разности чисел заполнения положительных и отрицательных квартионных состояний было продемонстрировано в гл. 7 на основе общего анализа уравнения (7.2).

Отметим в заключение, что при операции пространственной инверсии, как мы отмечали выше, происходит следующая замена: $r_u \rightarrow r_u$ и $r_d \rightarrow -r_d$, поэтому при операции пространственной инверсии вектор \mathbf{P} изменяет свой знак, а вектор \mathbf{M} остается неизменным.

10.4. Движение нейтрона в суперпозиции электрического и магнитного полей

В последнее время значительно возрос интерес к проблеме измерения электрического дипольного момента элементарных частиц и атомов. Существующие представления о возникновении электрического дипольного момента нейтрона основаны на нарушении CPT -инвариантности. Полагается [46–50], что дипольный момент нейтрона связан с его спином соотношением

$$\mathbf{d} = d_0 \Sigma. \quad (10.73)$$

Это соотношение может выполняться только при нарушении пространственной инверсии. Действительно, при инверсии координат полярный вектор \mathbf{d} меняет знак, а аксиальный вектор Σ знака не меняет. Соотношение (10.73) нарушает также и симметрию относительно изменения знака времени. Действительно, угловой момент частицы при изменении знака времени меняется на противоположный, а вектор \mathbf{d} , зависящий лишь от координат частиц, при изменении направления времени не меняется.

Основная идея экспериментов [46] по поиску электрического дипольного момента нейтрона основана на проверке соотношения (10.73). Действительно, если предположить справедливость соотношения (10.73), то при движении нейтрона в параллельных однородных магнитном и электрическом полях спин нейтрона будет прецессировать на частоте

$$\Omega = \frac{2|\mu_0 B_0 + d_0 E_0|}{\hbar}.$$

Изменение знака направления поля на противоположное приведет к изменению частоты прецессии на величину

$$\Delta\Omega = \frac{4|d_0 E_0|}{\hbar}. \quad (10.74)$$

Измеряемой величиной в экспериментах [46] является отношение $\Delta\Omega/\Omega$.

Как было показано в гл. 7, вектор \mathbf{P} , введенный согласно определению (7.21), находится в полном соответствии со всеми симметриями, предсказываемыми подгруппой CPT -преобразований. Следует поэтому ожидать, что характер взаимодействия нейтрона с электрическим полем будет кардинально различным в зависимости от того, применимы ли мы определение (7.21) или (10.73). Это дает дополнительные возможности проверки справедливости уравнения (7.2). Таким образом, результаты исследования задач о взаимодействии нейтрона с электрическими и магнитными полями имеют принципиальное значение для общей теории частиц с полужелым спином.

10.4.1. Волновые функции. Рассмотрим движение нейтрона в суперпозиции постоянного магнитного и электрического полей. Уравнение (10.3) имеет в этом случае вид

$$(\Delta + \kappa^2) \Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{2m_0\mu_0}{\hbar^2} (\Sigma\mathbf{B}) + i\frac{2m_0\mu_0}{\hbar^2} (\alpha\mathbf{E}) \right] \Psi(\mathbf{r}). \quad (10.75)$$

Будем полагать, что постоянные поля занимают полупространство. Для того чтобы корректно описать процесс проникновения свободной частицы в область, занятую полем, положим, что граница является плавной. Этому условию удовлетворяют следующие профили полей:

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{B}_0}{1 + \exp(-\beta z)}, \quad \mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}_0}{1 + \exp(-\beta z)}. \quad (10.76)$$

Положим, что векторы \mathbf{B}_0 и \mathbf{E}_0 лежат в плоскости (x, z) , тогда согласно (6.18) комплексный угол $\Phi = 0$ и спиноры (8.17) принимают вид

$$\begin{aligned} w_1 &= \begin{pmatrix} \cos \Theta/2 \\ \sin \Theta/2 \end{pmatrix}, & w_2 &= \begin{pmatrix} -\sin \Theta/2 \\ \cos \Theta/2 \end{pmatrix}, \\ w_3 &= \begin{pmatrix} \cos \Theta^*/2 \\ \sin \Theta^*/2 \end{pmatrix}, & w_4 &= \begin{pmatrix} -\sin \Theta^*/2 \\ \cos \Theta^*/2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (10.77)$$

где согласно общему определению

$$\cos \Theta(z) = \frac{B_z - iE_z}{\sqrt{(\mathbf{B} - i\mathbf{E})^2}}.$$

Учитывая, однако, формулы (10.76), мы видим, что в рассматриваемом случае комплексный угол Θ от координаты не зависит:

$$\cos \Theta = \frac{B_{0z} - iE_{0z}}{\sqrt{(\mathbf{B}_0 - \mathbf{E}_0)^2}}.$$

Таким образом, в соответствии с рассмотрением, проведенным в гл. 8, собственные значения спиновой части гамильтониана (10.75) имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 - i\mathbf{E}_0)^2}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 + i\mathbf{E}_0)^2}, \quad (10.78)$$

а соответствующие им собственные функции определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_1 \end{pmatrix}, & \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_2 \\ w_2 \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_3 \\ -w_3 \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w_4 \\ -w_4 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где трехмерные спиноры w_n определяются выражениями (10.77).

Поскольку оператор уравнения (10.75) коммутирует с проекциями оператора импульса, перпендикулярными оси z , то эти проекции импульса являются сохраняющимися величинами и мы можем считать, что волновая функция является лишь функцией z . Общее решение уравнения (10.75) имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n g_n(z),$$

где координатные волновые функции $g_n(z)$ являются решениями следующих уравнений:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 \right) g_n(z) = -\frac{2m_0\mu_0\lambda_n}{\hbar^2} \frac{1}{1 + \exp(-\beta z)} g_n(z). \quad (10.79)$$

Вводя новую координату

$$\xi = -\exp(-\beta z),$$

уравнение (10.79) можно привести к виду

$$\xi^2(1-\xi)g_n'' + \xi(1-\xi)g_n' + k^2(1-\xi)g_n - a_n g_n = 0, \quad (10.80)$$

где для определенности мы положили, что магнитный момент частицы является отрицательным, что, как мы уже отмечали выше, соответствует, например, нейтрону:

$$a_n = \frac{2m_0 |\mu_0| \lambda_n}{\hbar^2 \beta^2}, \quad k = \frac{\kappa}{\beta}.$$

Решение уравнения (10.80) имеет вид

$$g_n(z) = A_1 F(-ik - i\nu_n, ik - i\nu_n, 1 - i2\nu_n, \xi) \exp(i\nu_n z) + \\ + A_2 F(-ik + i\nu_n, ik + i\nu_n, 1 + i2\nu_n, \xi) \exp(-i\nu_n z), \quad (10.81)$$

где мы ввели безразмерную координату $z' = \beta z$ (штрихи здесь и далее опускаются), $A_{1,2}$ — константы,

$$\nu_n = \sqrt{k^2 - a_n}. \quad (10.82)$$

Несложно видеть, что при $z \rightarrow \infty$ функция $g_n(z)$ имеет следующую асимптотику:

$$g_n(z)|_{z \rightarrow \infty} = A_1 \exp(i\nu_n z) + A_2 \exp(-i\nu_n z). \quad (10.83)$$

10.4.2. Случай комплексных собственных значений. Собственные значения λ_n , определяющиеся формулами (10.78), в случае $\mathbf{B}_0 \perp \mathbf{E}_0$ становятся действительными ($B_0 > E_0$) или чисто мнимыми ($B_0 < E_0$). Рассмотрим сначала случай, когда произведение $\mathbf{B}_0 \mathbf{E}_0 \neq 0$ и является для определенности положительным. В этом случае выражение для величины волнового вектора в полупространстве $z > 0$,

$$\nu_1 = \sqrt{k^2 - \frac{2m_0 |\mu_0|}{\hbar^2 \beta^2} \sqrt{B_0^2 - E_0^2 - i2\mathbf{B}_0 \mathbf{E}_0}},$$

имеет положительную мнимую часть $\text{Im}(\nu_1) > 0$, в свою очередь $\text{Im}(\nu_3) < 0$. Аналогично, $\text{Im}(\nu_2) < 0$ и $\text{Im}(\nu_4) > 0$. Учитывая асимптотику (10.83), несложно видеть, что общее решение, удовлетворяющее условию конечности волновой функции при $z \rightarrow \infty$, имеет следующий вид:

$$\Psi(z) = A_1 \psi_1 F(-ik - i\nu_1, ik - i\nu_1, 1 - i2\nu_1, \xi) \exp(i\nu_1 z) + \\ + A_3 \psi_3 F(-ik + i\nu_3, ik + i\nu_3, 1 + i2\nu_3, \xi) \exp(-i\nu_3 z) + \\ + A_2 \psi_2 F(-ik + i\nu_2, ik + i\nu_2, 1 + i2\nu_2, \xi) \exp(-i\nu_2 z) + \\ + A_4 \psi_4 F(-ik - i\nu_4, ik - i\nu_4, 1 - i2\nu_4, \xi) \exp(i\nu_4 z). \quad (10.84)$$

Введем функции

$$G_1(k, \nu, z) = t_1(k, \nu) F(-ik - i\nu, ik - i\nu, 1 - i2\nu, \xi) \exp(i\nu z), \quad (10.85a)$$

$$G_2(k, \nu, z) = t_2(k, \nu) F(-ik + i\nu, ik + i\nu, 1 + i2\nu, \xi) \exp(-i\nu z), \quad (10.85b)$$

где

$$\begin{aligned} t_1(k, \nu) &= \frac{\Gamma(-ik - i\nu)\Gamma(1 - ik - i\nu)}{\Gamma(1 - i2\nu)\Gamma(-i2k)}, \\ t_2(k, \nu) &= \frac{\Gamma(-ik + i\nu)\Gamma(1 - ik + i\nu)}{\Gamma(1 + i2\nu)\Gamma(-i2k)}. \end{aligned} \quad (10.86)$$

Функции $G_{1,2}(k, \nu, z)$ имеют следующую асимптотическую форму:

$$G_1(k, \nu, z) = \begin{cases} t_1(k, \nu) \exp(i\nu z), & z \rightarrow \infty, \\ \exp(ikz) + r_1(k, \nu) \exp(-ikz), & z \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (10.87)$$

и

$$G_2(k, \nu, z) = \begin{cases} t_2(k, \nu) \exp(i\nu z), & z \rightarrow \infty, \\ \exp(ikz) + r_2(k, \nu) \exp(-ikz), & z \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad (10.88)$$

где

$$\begin{aligned} r_1(k, \nu) &= \frac{\Gamma(-ik - i\nu)\Gamma(1 - ik - i\nu)\Gamma(i2k)}{\Gamma(ik - i\nu)\Gamma(1 + ik - i\nu)\Gamma(-i2k)}, \\ r_2(k, \nu) &= \frac{\Gamma(-ik + i\nu)\Gamma(1 - ik + i\nu)\Gamma(i2k)}{\Gamma(ik + i\nu)\Gamma(1 + ik + i\nu)\Gamma(-i2k)}. \end{aligned} \quad (10.89)$$

Несложно видеть, что каждая из функций $G_{1,2}(k, \nu, z)$ нормирована на единичный поток падающих частиц, а функции $r_{1,2}(k, \nu)$ и $t_{1,2}(k, \nu)$ являются парциальными амплитудами отраженных и прошедших волн соответственно.

С помощью введенных функций $G_{1,2}(k, \nu, z)$ общее решение можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= C_1 \psi_1 G_1(k, \nu_1, z) + C_3 \psi_3 G_2(k, \nu_1^*, z) + \\ &\quad + C_2 \psi_2 G_2(k, \nu_2, z) + C_4 \psi_4 G_1(k, \nu_2^*, z), \end{aligned}$$

где мы учли соотношения между собственными значениями (10.78), приводящие в свою очередь к следующим соотношениям: $\nu_3 = \nu_1^*$ и $\nu_4 = \nu_2^*$. Учитывая асимптотики (10.87) и (10.88), для волновой функции падающей частицы получаем

$$\Psi_0(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n \exp(ikz). \quad (10.90)$$

Волновые функции отраженной $\Psi_r(z)$ и прошедшей $\Psi_t(z)$ частиц имеют соответственно следующий вид:

$$\Psi_r(z) = [C_1\psi_1r_1(k, \nu_1) + C_3\psi_3r_2(k, \nu_1^*) + C_2\psi_2r_2(k, \nu_2) + C_4\psi_4r_1(k, \nu_2^*)] \exp(-ikz), \quad (10.91)$$

$$\Psi_t(z) = C_1\psi_1t_1(k, \nu_1) \exp(i\nu_1z) + C_3\psi_3t_2(k, \nu_1^*) \exp(-i\nu_1^*z) + C_2\psi_2t_2(k, \nu_2) \exp(-i\nu_2z) + C_4\psi_4t_1(k, \nu_2^*) \exp(i\nu_2^*z). \quad (10.92)$$

Используя волновые функции (10.90) и (10.91), для энергетического коэффициента отражения получаем

$$R = \frac{C_1^*C_3r_1^*(k, \nu_1)r_2(k, \nu_1^*) + C_3^*C_1r_2^*(k, \nu_1^*)r_1(k, \nu_1)}{C_1^*C_3 + C_3^*C_1 + C_2^*C_4 + C_4^*C_2} + \frac{C_2^*C_4r_2^*(k, \nu_2)r_1(k, \nu_2^*) + C_4^*C_2r_1^*(k, \nu_2^*)r_2(k, \nu_2)}{C_1^*C_3 + C_3^*C_1 + C_2^*C_4 + C_4^*C_2}. \quad (10.93)$$

Используя формулы (10.89), несложно показать, что

$$r_1^*(k, \nu)r_2(k, \nu^*) \equiv 1.$$

Таким образом, энергетический коэффициент отражения, определяемый формулой (10.95), тождественно равен единице:

$$R \equiv 1. \quad (10.94)$$

С другой стороны, учитывая, что согласно формуле (10.92)

$$\Psi_t(z)|_{z=\infty} = 0,$$

для коэффициента прохождения получаем

$$T = 0. \quad (10.95)$$

Таким образом, нейтральная частица полностью выталкивается из области, занятой суперпозицией постоянных электрического и магнитного полей в случае, когда $\mathbf{B}_0\mathbf{E}_0 \neq 0$.

Возвращаясь к обсуждению экспериментов, которые мы упоминали во введении к данному разделу, следует отметить, что в случае параллельных электрического и магнитного полей волновые векторы ν_n определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \nu_1 &= \sqrt{k^2 - a + ib}, & \nu_2 &= \sqrt{k^2 + a - ib}, \\ \nu_3 &= \sqrt{k^2 - a - ib}, & \nu_4 &= \sqrt{k^2 + a + ib}, \end{aligned}$$

где

$$a = \frac{2m_0|\mu_0|B_0}{\hbar^2\beta^2}, \quad b = \frac{2m_0|\mu_0|E_0}{\hbar^2\beta^2}.$$

Таким образом, при движении нейтрона по направлению параллельных магнитного и электрического полей пространственная частота

прецессии поперечной проекции спина будет определяться следующим выражением:

$$\Delta\nu = \operatorname{Re} \left(\sqrt{k^2 - a + ib} \right) - \operatorname{Re} \left(\sqrt{k^2 + a + ib} \right). \quad (10.96)$$

При $k^2 > b$ получаем

$$\Delta\nu \approx \Delta\nu_0 + \frac{b^2}{8} \left(\frac{1}{(k^2 - a)^{3/2}} - \frac{1}{(k^2 + a)^{3/2}} \right),$$

где $\Delta\nu_0 = \sqrt{k^2 - a} - \sqrt{k^2 + a}$ — пространственная частота прецессии спина в однородном магнитном поле. Итак, мы видим, что поправка к частоте прецессии спина, обусловленная ненулевым значением напряженности электрического поля, параллельного магнитному, является величиной порядка

$$\Delta\nu - \Delta\nu_0 \approx \left(\frac{|\mu_0|}{E - m_0 c^2} \right)^3 E_0^2 B_0 k,$$

в то время как

$$\Delta\nu_0 \approx \frac{|\mu_0| B_0}{E - m_0 c^2} k.$$

Отсюда получаем

$$\frac{\Delta\nu - \Delta\nu_0}{\Delta\nu_0} \approx \left(\frac{|\mu_0| E_0}{E - m_0 c^2} \right)^2.$$

Замечания и выводы

Таким образом, проведенные оценки позволяют сделать следующие выводы.

Во-первых, в отличие от (10.74), поправка к частоте прецессии, связанная с наличием электрического поля, пропорциональна не отношению напряженностей электрического и магнитного полей, а зависит от квадрата напряженности электрического поля.

Во-вторых, поскольку поправка квадратична по напряженности электрического поля, то изменение направления электрического поля по отношению к направлению магнитного не приводит к изменению частоты прецессии спина нейтрона. Отметим, что квадратичная зависимость $\Delta\nu$ от напряженности электрического поля следует и из общей формулы (10.96).

10.4.3. Случай действительных и чисто мнимых собственных значений. В случае когда $\mathbf{B}_0 \perp \mathbf{E}_0$, волновые векторы ν_n принимают вид

$$\begin{aligned} \nu_1 &= \sqrt{k^2 - \frac{2m_0 |\mu_0|}{\hbar^2 \beta^2} \sqrt{B_0^2 - E_0^2}}, & \nu_2 &= \sqrt{k^2 + \frac{2m_0 |\mu_0|}{\hbar^2 \beta^2} \sqrt{B_0^2 - E_0^2}}, \\ \nu_3 &= \nu_1^*, & \nu_4 &= \nu_2^*. \end{aligned} \quad (10.97)$$

При $B_0 < E_0$ общее решение имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi(z) = & A_1 \psi_1 F(-ik + i\nu_1, ik + i\nu_1, 1 + i2\nu_1, \xi) \exp(-i\nu_1 z) + \\ & + A_3 \psi_3 F(-ik - i\nu_1^*, ik - i\nu_1^*, 1 - i2\nu_1^*, \xi) \exp(i\nu_1^* z) + \\ & + A_2 \psi_2 F(-ik - i\nu_2, ik - i\nu_2, 1 - i2\nu_2, \xi) \exp(i\nu_2 z) + \\ & + A_4 \psi_4 F(-ik + i\nu_2^*, ik + i\nu_2^*, 1 + i2\nu_2^*, \xi) \exp(-i\nu_2^* z). \end{aligned} \quad (10.98)$$

Из формул (10.97) следует, что

$$\nu_2 = \nu_1^*, \quad (10.99)$$

поэтому данный случай является частным случаем рассмотренного в предыдущем подразделе, не проводя никаких вычислений, можно сразу записать выражения для энергетических коэффициентов отражения и преломления:

$$R = 1, \quad T = 0. \quad (10.100)$$

Отличие рассматриваемого случая от случая, когда векторы \mathbf{B}_0 и \mathbf{E}_0 не являются ортогональными, состоит в том, что из (10.97) и (10.99) вытекает: $\text{Re}(\nu_n) = \text{Re}(\nu_1)$. Следовательно, в ортогональных электрическом и магнитном полях спин не прецессирует, если $B_0 < E_0$.

Следует отметить, что формулы (10.98) и (10.100) справедливы и при $B_0 = 0$, поэтому случай взаимодействия нейтрона с постоянным электрическим полем, занимающим полупространство, не требует отдельного рассмотрения.

В случае $B_0 > E_0$ волновые векторы $\nu_2 = \nu_4$ всегда являются действительными, а волновые векторы $\nu_1 = \nu_3$ действительны при $k > k_0 = \sqrt{2m_0 |\mu_0| \sqrt{B_0^2 - E_0^2}} / \hbar\beta$ и чисто мнимы в обратном случае. Общее решение, удовлетворяющее условию конечности волновой функции при $z \rightarrow \infty$, имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n G_1(k, \nu_n, z), \quad (10.101)$$

где $G_1(k, \nu, z)$ определяется формулой (10.87).

Используя (10.101) для энергетического коэффициента отражения, получаем

$$\begin{aligned} R = & \frac{C_1^* C_3 + C_3^* C_1}{C_1^* C_3 + C_3^* C_1 + C_2^* C_4 + C_4^* C_2} R_1 + \\ & + \frac{C_2^* C_4 + C_4^* C_2}{C_1^* C_3 + C_3^* C_1 + C_2^* C_4 + C_4^* C_2} R_2, \end{aligned} \quad (10.102)$$

где

$$\begin{aligned} R_1 = & |r_1(k, \nu_1)|^2 = \left(\frac{\text{sh}(\pi(k - \text{Re}(\nu_1)))}{\text{sh}(\pi(k + \text{Re}(\nu_1)))} \right)^2, \\ R_2 = & |r_1(k, \nu_2)|^2 = \left(\frac{\text{sh}(\pi(k - \nu_2))}{\text{sh}(\pi(k + \nu_2))} \right)^2. \end{aligned} \quad (10.103)$$

Для энергетического коэффициента прохождения получаем

$$T = \frac{C_1^* C_3 + C_3^* C_1}{C_1^* C_3 + C_3^* C_1 + C_2^* C_4 + C_4^* C_2} T_1 + \frac{C_2^* C_4 + C_4^* C_2}{C_1^* C_3 + C_3^* C_1 + C_2^* C_4 + C_4^* C_2} T_2, \quad (10.104)$$

где

$$T_1 = \frac{\text{sh}(2\pi \text{Re}(\nu_1)) \text{sh}(2\pi k)}{\text{sh}^2(\pi(k + \text{Re}(\nu_1)))}, \quad T_2 = \frac{\text{sh}(2\pi\nu_2) \text{sh}(2\pi k)}{\text{sh}^2(\pi(k + \nu_2))}. \quad (10.105)$$

Несложно видеть, что

$$R + T \equiv 1.$$

Обратимся вновь к обсуждению экспериментов по измерению частоты прецессии спина в суперпозиции постоянных электрического и магнитного полей. Из (10.101) следует, что частота прецессии спина определяется следующим выражением:

$$\Delta\nu = \sqrt{k^2 + \sqrt{a^2 - b^2}} - \sqrt{k^2 - \sqrt{a^2 - b^2}}. \quad (10.106)$$

При энергии налетающего нейтрона, существенно превышающей пороговую энергию отражения, для $\Delta\nu$ получаем

$$\Delta\nu = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{k}.$$

Из (10.106) следует, что частота прецессии квадратично зависит от напряженности электрического поля. Следовательно, изменение направления электрического поля не приводит к изменению частоты прецессии спина и в случае взаимно перпендикулярных магнитного и электрического полей.

10.4.4. Зависимость параметров рассеянных частиц от состояния налетающей частицы. Исследуем зависимость компонент 4-векторов $M_\mu^{(r)}$ и $P_\mu^{(r)}$ от начального состояния частицы, задаваемого компонентами 4-векторов $M_\mu^{(0)}$ и $P_\mu^{(0)}$. Запишем волновую функцию отраженной частицы в виде

$$\Psi_r(z) = [C_1\psi_1 r_1 + C_2\psi_2 r_2 + C_3\psi_3 r_3 + C_4\psi_4 r_4] \exp(-ikz). \quad (10.107)$$

Выше мы отмечали, что парциальные коэффициенты отражения обладают следующими симметричными свойствами:

$$r_1 r_3^* = 1, \quad r_2 r_4^* = 1. \quad (10.108)$$

Используя волновую функцию (10.107), получаем

$$\begin{aligned}
N_r &= C_1 C_3^* r_1 r_3^* + C_2 C_4^* r_2 r_4^* + C_1^* C_3 r_1^* r_3 + C_2^* C_4 r_2^* r_4, \\
M_x^{(r)} &= (C_1 C_4^* r_1 r_4^* + C_2 C_3^* r_2 r_3^*) \cos \Theta + (C_1^* C_4 r_1^* r_4 + C_2^* C_3 r_2^* r_3) \cos \Theta^* + \\
&\quad + (C_1 C_3^* r_1 r_3^* - C_2 C_4^* r_2 r_4^*) \sin \Theta + (C_1^* C_3 r_1^* r_3 - C_2^* C_4 r_2^* r_4) \sin \Theta^*, \\
M_y^{(r)} &= i (C_1 C_4^* r_1 r_4^* - C_2 C_3^* r_2 r_3^*) - i (C_1^* C_4 r_1^* r_4 - C_2^* C_3 r_2^* r_3), \\
M_z^{(r)} &= -(C_1 C_4^* r_1 r_4^* + C_2 C_3^* r_2 r_3^*) \sin \Theta - (C_1^* C_4 r_1^* r_4 + C_2^* C_3 r_2^* r_3) \sin \Theta^* + \\
&\quad + (C_1 C_3^* r_1 r_3^* - C_2 C_4^* r_2 r_4^*) \cos \Theta + (C_1^* C_3 r_1^* r_3 - C_2^* C_4 r_2^* r_4) \cos \Theta^*, \\
P_x^{(r)} &= -i (C_1 C_4^* r_1 r_4^* + C_2 C_3^* r_2 r_3^*) \cos \Theta + i (C_1^* C_4 r_1^* r_4 + C_2^* C_3 r_2^* r_3) \cos \Theta^* + \\
&\quad + i (C_1 C_3^* r_1 r_3^* - C_2 C_4^* r_2 r_4^*) \sin \Theta + i (C_1^* C_3 r_1^* r_3 - C_2^* C_4 r_2^* r_4) \sin \Theta^*, \\
P_y^{(r)} &= (C_1 C_4^* r_1 r_4^* - C_2 C_3^* r_2 r_3^*) + (C_1^* C_4 r_1^* r_4 - C_2^* C_3 r_2^* r_3), \\
P_z^{(r)} &= i (C_1 C_4^* r_1 r_4^* + C_2 C_3^* r_2 r_3^*) \sin \Theta - i (C_1^* C_4 r_1^* r_4 + C_2^* C_3 r_2^* r_3) \sin \Theta^* - \\
&\quad - i (C_1 C_3^* r_1 r_3^* - C_2 C_4^* r_2 r_4^*) \cos \Theta + i (C_1^* C_3 r_1^* r_3 - C_2^* C_4 r_2^* r_4) \cos \Theta^*, \\
\Gamma_r &= i (C_1 C_3^* r_1 r_3^* + C_2 C_4^* r_2 r_4^* - C_1^* C_3 r_1^* r_3 - C_2^* C_4 r_2^* r_4).
\end{aligned} \tag{10.109}$$

Несложно убедиться, что 4-векторы M_μ и P_μ , так же как и в предыдущих случаях, ортогональны друг другу во всех точках пространства:

$$M_\mu P_\mu = 0. \tag{10.110}$$

Длина 4-векторов M_μ и P_μ также одинакова и для отраженной волны имеет вид

$$\begin{aligned}
M_\mu M_\mu = P_\mu P_\mu &= 4 \left[(|C_1|^2 |r_1|^2 + |C_2|^2 |r_2|^2) \cos((\Theta - \Theta^*)/2) + \right. \\
&\quad \left. + (C_1 C_2^* r_1 r_2^* - C_1^* C_2 r_1^* r_2) \sin((\Theta - \Theta^*)/2) \right] \times \\
&\quad \times \left[(|C_3|^2 |r_3|^2 + |C_4|^2 |r_4|^2) \cos((\Theta - \Theta^*)/2) - \right. \\
&\quad \left. - (C_3 C_4^* r_3 r_4^* - C_3^* C_4 r_3^* r_4) \sin((\Theta - \Theta^*)/2) \right].
\end{aligned}$$

Полагая в (10.109) $r_i = 1$, мы получаем выражения для 4-векторов $M_\mu^{(0)}$ и $P_\mu^{(0)}$. Поэтому, учитывая симметричные свойства (10.108), получаем

$$N_r = N_0, \quad \Gamma_r = \Gamma_0.$$

Полученное соотношение согласуется с формулами (10.94)–(10.95), поскольку

$$R = \frac{N_r}{N_0} = 1.$$

Учитывая ортогональность 4-векторов M_μ и P_μ , из (10.110) получаем

$$\mathbf{M}^{(r)} \mathbf{P}^{(r)} = \mathbf{M}^{(0)} \mathbf{P}^{(0)}.$$

Следовательно, компоненты векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} в отраженной волне выражаются только через компоненты этих векторов в падающей волне.

Система уравнений (10.109) зависит от восьми действительных величин, являющихся действительными и мнимыми частями следующих произведений:

$$C_1 C_3^*, \quad C_1 C_4^*, \quad C_2 C_3^*, \quad C_2 C_4^*.$$

Разрешая эту систему уравнений, для компонент вектора магнитной поляризации отраженной волны, например, получаем

$$\begin{aligned} M_x^{(r)} &= M_x^{(0)} \frac{1}{8} [4 + R_1 + R_2 + R_1^* + R_2^* - (2 - R_1 - R_2) \cos 2\Theta - \\ &\quad - (2 - R_1^* - R_2^*) \cos 2\Theta^*] - M_y^{(0)} \frac{i}{4} [(R_1 - R_2) \sin \Theta - (R_1^* - R_2^*) \sin \Theta^*] + \\ &\quad + M_z^{(0)} \frac{1}{8} [(2 - R_1 - R_2) \sin 2\Theta + (2 - R_1^* - R_2^*) \sin 2\Theta^*] + \\ &\quad + P_x^{(0)} \frac{i}{8} [R_1 + R_2 - R_1^* - R_2^* - (2 - R_1 - R_2) \cos 2\Theta + \\ &\quad + (2 - R_1^* - R_2^*) \cos 2\Theta^*] + P_y^{(0)} \frac{1}{4} [(R_1 - R_2) \sin \Theta + (R_1^* - R_2^*) \sin \Theta^*] + \\ &\quad + P_z^{(0)} \frac{i}{8} [(2 - R_1 - R_2) \sin 2\Theta - (2 - R_1^* - R_2^*) \sin 2\Theta^*], \\ M_y^{(r)} &= M_y^{(0)} \frac{1}{4} (R_1 + R_2 + R_1^* + R_2^*) + M_x^{(0)} \frac{i}{4} [(R_1 - R_2) \cos \Theta - \\ &\quad - (R_1^* - R_2^*) \cos \Theta^*] - M_z^{(0)} \frac{i}{4} [(R_1 - R_2) \sin \Theta - (R_1^* - R_2^*) \sin \Theta^*] - \\ &\quad - P_x^{(0)} \frac{1}{4} [(R_1 - R_2) \cos \Theta + (R_1^* - R_2^*) \cos \Theta^*] + \\ &\quad + P_y^{(0)} \frac{i}{4} (R_1 + R_2 - R_1^* - R_2^*) + P_z^{(0)} \frac{1}{4} [(R_1 - R_2) \sin \Theta + (R_1^* - R_2^*) \sin \Theta^*], \\ M_z^{(r)} &= M_z^{(0)} \frac{1}{8} [4 + R_1 + R_2 + R_1^* + R_2^* + (2 - R_1 - R_2) \cos 2\Theta + \\ &\quad + (2 - R_1^* - R_2^*) \cos 2\Theta^*] + M_x^{(0)} \frac{1}{8} [(2 - R_1 - R_2) \sin 2\Theta + \\ &\quad + (2 - R_1^* - R_2^*) \sin 2\Theta^*] + M_y^{(0)} \frac{i}{4} [(R_1 - R_2) \sin \Theta - (R_1^* - R_2^*) \sin \Theta^*] + \\ &\quad + P_x^{(0)} \frac{i}{8} [(2 - R_1 - R_2) \sin 2\Theta - (2 - R_1^* - R_2^*) \sin 2\Theta^*] - \\ &\quad - P_y^{(0)} \frac{1}{4} [(R_1 - R_2) \sin \Theta + (R_1^* - R_2^*) \sin \Theta^*] + \\ &\quad + P_z^{(0)} \frac{i}{8} [R_1 + R_2 - R_1^* - R_2^* + (2 - R_1 - R_2) \cos 2\Theta - (2 - R_1^* - R_2^*) \cos 2\Theta^*], \end{aligned} \quad (10.111)$$

где коэффициенты $R_{1,2}$ отличаются от коэффициентов (10.103) и определяются выражениями

$$R_1 = r_1 r_4^*, \quad R_2 = r_2 r_3^*.$$

Аналогичный вид будут иметь формулы и для вектора электрической поляризации отраженной волны.

Несложно видеть, что каждая из компонент векторов $\mathbf{M}^{(0)}$ и $\mathbf{P}^{(0)}$ влияет на каждую из компонент векторов \mathbf{M} и \mathbf{P} . В этом проявляется специфика взаимодействия нейтрона с суперпозицией электрического и магнитного полей.

10.4.5. Общие квартионные состояния. В случае взаимодействия частицы только с магнитным или только с электрическим полем коммутирующей величиной является оператор проекции спина на направление поля Σ_z , поэтому в качестве трехмерных спиноров w_n удобно выбрать собственные функции уравнения $\sigma_z u_\sigma = \sigma u_\sigma$. В этом случае собственные значения являются либо действительными, либо чисто мнимыми, а спиноры w_n всегда могут быть выбраны в виде

$$w_1 = w_3 = u_{\sigma=+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w_2 = w_4 = u_{\sigma=-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

В рассматриваемом случае состояния падающей частицы с положительным Ψ_p и отрицательным Ψ_a значениями нормы волновой функции могут быть образованы для каждого из состояний поляризации по отдельности. Действительно, при движении частицы в магнитном поле биспиноры ψ_n с положительной и отрицательной нормами являются ортогональными, и поэтому уравнения для Ψ_p и Ψ_a являются независимыми. При движении частицы в электрическом поле решения, соответствующие падающей частице с положительным и отрицательным значениями нормы волновой функции для $\sigma = +1$, имеют, например, вид

$$\begin{aligned} \Psi_p^{(\sigma=+1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_3) \exp(i\kappa z) = \begin{pmatrix} w_1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z), \\ \Psi_a^{(\sigma=+1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - \psi_3) \exp(i\kappa z) = \begin{pmatrix} 0 \\ w_1 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z). \end{aligned} \quad (10.112)$$

При движении частицы в суперпозиции электрического и магнитного полей спиноры w_n являются комплексными, поэтому и верхний и нижний спиноры биспинорных волновых функций вида (10.112) не равны нулю:

$$\begin{aligned} \Psi_p &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_3) \exp(i\kappa z) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} w_1 + w_3 \\ w_1 - w_3 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z), \\ \Psi_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - \psi_3) \exp(i\kappa z) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} w_1 - w_3 \\ w_1 + w_3 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z). \end{aligned} \quad (10.113)$$

Норма волновой функции Ψ_p в (10.113) по-прежнему положительна ($\bar{\Psi}_p \Psi_p = 1$), а волновой функции Ψ_a — отрицательна ($\bar{\Psi}_a \Psi_a = -1$), несмотря на то что состояния (10.113) являются суперпозиционными. Единственное исключение составляет случай параллельных полей $\mathbf{B}_0 \parallel \mathbf{E}_0$, поскольку в этом случае оператор проекции спина

на направление полей ($\mathbf{n}_E \Sigma$) коммутирует с оператором уравнения (7.2) и спиноры w_n могут быть выбраны действительными.

Встает вопрос, можно ли задать в общем случае состояние падающей волны в виде положительного или отрицательного квартиона. Общий ответ на этот вопрос был дан в разделе 8.6.6. Проиллюстрируем его на примере взаимодействия частицы с суперпозицией электрического и магнитного полей, рассмотренных выше. Покажем, что выбором коэффициентов C_n в общем решении (10.90) или (10.101) мы всегда можем привести волновую функцию падающей частицы к виду положительного квартиона. Действительно, волновая функция падающей частицы имеет вид

$$\Psi_0(z) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n \exp(i\kappa z).$$

Воспользуемся формулами (8.17) для спиноров w_n , тогда, полагая

$$\begin{aligned} C_1 &= \exp\left(-i\frac{\Phi - \Phi^*}{2}\right) \left(C_3 \sin \frac{\Theta^*}{2} + C_4 \cos \frac{\Theta^*}{2}\right) \sin \frac{\Theta}{2} + \\ &\quad + \exp\left(i\frac{\Phi - \Phi^*}{2}\right) \left(C_3 \cos \frac{\Theta^*}{2} - C_4 \sin \frac{\Theta^*}{2}\right) \cos \frac{\Theta}{2}, \\ C_2 &= \exp\left(-i\frac{\Phi - \Phi^*}{2}\right) \left(C_3 \sin \frac{\Theta^*}{2} + C_4 \cos \frac{\Theta^*}{2}\right) \cos \frac{\Theta}{2} - \\ &\quad - \exp\left(i\frac{\Phi - \Phi^*}{2}\right) \left(C_3 \cos \frac{\Theta^*}{2} - C_4 \sin \frac{\Theta^*}{2}\right) \sin \frac{\Theta}{2}, \end{aligned}$$

для волновой функции падающей частицы получаем

$$\Psi_0(z) = \sqrt{2} \left[C_3 \begin{pmatrix} w_3 \\ 0 \end{pmatrix} + C_4 \begin{pmatrix} w_4 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \exp(i\kappa z).$$

Полагая $C_3 = C_4 = 1/\sqrt{2}$, имеем

$$\Psi_0(z) = \begin{pmatrix} w_+(\Theta^*, \Phi^*) + w_-(\Theta^*, \Phi^*) \\ 0 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z), \quad (10.114)$$

где в соответствии с формулами (8.54)

$$w_{\pm}(\Theta^*, \Phi^*) = \exp\left(-\frac{\Phi''}{2}\sigma_3\right) \exp\left(-\frac{\Theta''}{2}\sigma_{\Phi}\right) w_{\pm}(\Theta', \Phi').$$

Таким образом, состояние частицы (10.114) является суперпозицией состояний с противоположными проекциями спина на направление, задаваемое действительной частью комплексных углов Θ и Φ . Неудивительно поэтому, что коэффициенты отражения (10.102) и прохождения (10.104) для налетающей частицы, находящейся в состоянии (10.114), принимают вид

$$R = \frac{1}{2}(R_1 + R_2), \quad T = \frac{1}{2}(T_1 + T_2).$$

Глава 11

КВАРТИОННЫЕ РЕЗОНАНСЫ И ПРОЦЕССЫ РОЖДЕНИЯ ЧАСТИЦ И АНТИЧАСТИЦ

В предыдущих двух главах мы получили общее решение задачи о рассеянии заряженной и нейтральной частиц электрическим полем и проанализировали характерные черты указанных процессов. Однако среди решений этих задач есть специальные случаи, которые приводят к принципиально новым физическим явлениям. Поэтому анализу указанных специальных случаев мы посвящаем отдельную главу.

Обратимся вновь к обсуждению общего решения уравнения (7.2). Как было показано в гл. 8, общее решение уравнения (7.2) представимо в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n g_n(\mathbf{r}), \quad (11.1)$$

где ортогональные биспиноры ψ_n являются собственными функциями оператора $-i\mu_0\gamma_\mu\gamma_\nu F_{\nu\mu}/2$, входящего в это уравнение, и обладают свойствами ортогональности, определяемыми соотношениями (8.19). Поскольку оператор γ_5 коммутирует с оператором уравнения (7.2), то ортогональные биспиноры являются одновременно четными или нечетными собственными функциями оператора γ_5 :

$$\gamma_5\psi_\pm = \pm\psi_\pm,$$

где

$$\psi_\pm = \begin{pmatrix} w_\pm \\ \mp w_\pm \end{pmatrix}. \quad (11.2)$$

Как видно, собственные функции оператора γ_5 отвечают безмассовым возбуждениям спинорного поля, поскольку

$$\bar{\psi}_\pm\psi_\pm = w_\pm^\dagger w_\pm - w_\pm^\dagger w_\pm = 0.$$

В одномерных задачах рассеяния асимптотический вид волновой функции падающей частицы определяется выражением

$$\Psi_0(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \sum_{n=1}^4 C_n \psi_n \exp(i\kappa z),$$

а с учетом свойств ортогональности биспиноров ψ_n энергетический коэффициент отражения имеет вид

$$\begin{aligned} R &= \frac{-\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_r \cdot \Psi_r - \bar{\Psi}_r \cdot \nabla \Psi_r)|_{z \rightarrow -\infty}}{\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_0 \cdot \Psi_0 - \bar{\Psi}_0 \cdot \nabla \Psi_0)|_{z \rightarrow -\infty}} = \\ &= \frac{C_1^* C_3 r_1^* r_3 + C_3^* C_1 r_3^* r_1 + C_2^* C_4 r_2^* r_4 + C_4^* C_2 r_4^* r_2}{C_1^* C_3 + C_3^* C_1 + C_2^* C_4 + C_4^* C_2}. \quad (11.3) \end{aligned}$$

Таким образом, если падающая частица находится в одном из собственных состояний оператора $\Sigma \mathbf{B} - i\alpha \mathbf{E}$, например $C_1 \neq 0$ и $C_2 = C_3 = C_4 = 0$, то плотность потока отраженных частиц $\mathbf{e}_z (\nabla \bar{\Psi}_r \cdot \Psi_r - \bar{\Psi}_r \cdot \nabla \Psi_r)$ обращается в нуль. Следовательно, можно было бы сказать, что безмассовые элементарные возбуждения спинорного поля электромагнитным полем не рассеиваются. Однако необходимо отметить, что и плотность потока падающих частиц в этом случае также равна нулю. Как мы видели из анализа, проведенного в предыдущих главах, конечные значения коэффициент отражения принимает тогда, когда падающая частица находится в одном из квартионных состояний (8.85). Квартионные состояния являются суперпозицией собственных состояний (11.2) и отвечают конечной массе или энергии частицы.

Каждое из состояний (11.2) является когерентной суперпозицией положительного и отрицательного квартионных состояний:

$$\begin{pmatrix} w \\ \pm w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w \\ 0 \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 0 \\ w \end{pmatrix}.$$

Если состояние падающей частицы является такой когерентной суперпозицией, то равна нулю и плотность потока падающих частиц, т. е. в случае $C_1 \neq 0$ и $C_2 = C_3 = C_4 = 0$ равен нулю не только числитель, но и знаменатель выражения (11.3). Встает естественный вопрос: кроется ли какая-либо физика за математической неопределенностью выражения (11.3) в указанном случае? Этот вопрос можно перевести из математической плоскости в физическую, где он будет звучать следующим образом: возможен ли распад безмассового квартиона на положительный и отрицательный квартионы? Как следует из предыдущего обсуждения, этот процесс не запрещен законами сохранения заряда и энергии. Однако предшествующий анализ таких процессов пока не выявил.

Настоящая глава посвящена ответу на этот вопрос. Мы увидим, что при наличии внешнего электромагнитного поля состояние спинорного материального поля может качественно отличаться от состояния свободного спинорного поля. Предпосылки указанных качественных изменений уже были выявлены нами в предыдущей главе и состоят в том, что каждое из ортогональных состояний в (11.1) обладает различными дисперсионными свойствами, которые зависят от напряженности электрического и магнитного полей.

С точки зрения теории волновых процессов, задача о взаимодействии частицы с пространственно неоднородным внешним электромагнитным полем эквивалентна задаче о распространении, например, оптического излучения в пространственно неоднородной среде. Одной из характерных особенностей распространения оптического излучения в пространственно неоднородных средах является возможность возникновения собственных волн, например волноводного распространения света. Граничные условия, определяющие режим волноводного распространения света, качественно отличаются от граничных условий задачи

рассеяния света в неоднородной среде. Указанная аналогия позволит нам объяснить специфику состояний спинорного материального поля, взаимодействующего с пространственно неоднородным электромагнитным полем.

11.1. Резонансное рассеяние нейтральных частиц электрическим полем

В разделе 10.3 мы рассмотрели задачу о рассеянии спинорных нейтральных частиц стационарным электрическим полем. Проведенный анализ показал, что сечение рассеяния нейтрона электрическим полем имеет пороговый характер: электрическим полем эффективно рассеиваются лишь нейтроны, энергия которых ниже пороговой. Формулы, приведенные в предыдущей главе, позволяют оценить величину требуемой напряженности электрического поля.

Однако, как мы отмечали во введении к настоящей главе, среди решений задачи о рассеянии частицы электрическим полем есть специальные случаи, к анализу которых мы и перейдем.

11.1.1. Условия резонансного рассеяния. Вернемся к обсуждению задачи о рассеянии нейтронов электрическим полем следующего вида:

$$\mathbf{E}(z) = \frac{\mathbf{E}_0}{\operatorname{ch}^2(\beta z)}.$$

Общее выражение для коэффициентов отражения и прохождения определяется формулами (10.60), а в случае когда состояние падающей частицы является суперпозицией положительных квартионов, они определяются формулами (10.62). На основе анализа свойств общего решения задачи о рассеянии нейтрона электрическим полем, проведенного в предыдущей главе, мы уже отмечали, что даже в случае когда падающая частица находится в положительном квартионном состоянии, норма волновой функции рассеянных частиц, определяемая выражением (10.47), не является заведомо положительно определенной величиной. В случае рассеяния нейтральных частиц изменение знака энергетических коэффициентов отражения R или прохождения T свидетельствует о том, что либо прошедшая, либо отраженная волны соответствуют состояниям материального поля в виде античастицы.

Действительно, обратимся к (10.62). Воспользуемся следующей тригонометрической формулой:

$$\sin(\pi s) = \sin(\pi s') \operatorname{ch}(\pi s'') + i \cos(\pi s') \operatorname{sh}(\pi s''). \quad (11.4)$$

Из этой простой формулы следует, что в случае когда действительная часть параметра s является целым числом,

$$s' = n, \quad (11.5)$$

формулы для коэффициентов R и T принимают вид

$$R = \frac{\operatorname{sh}^2(\pi s'')}{\operatorname{sh}^2(\pi s'') - \operatorname{sh}^2(\pi k)}, \quad T = -\frac{\operatorname{sh}^2(\pi k)}{\operatorname{sh}^2(\pi s'') - \operatorname{sh}^2(\pi k)}. \quad (11.6)$$

Из формул (11.6) следует, что в случае когда выполняется условие (11.5), знак нормы волновой функции отраженной или прошедшей частицы отличается от знака нормы волновой функции падающей частицы. Следовательно, процесс рассеяния нейтральной частицы электрическим полем будет сопровождаться в этом случае рождением античастиц. Отметим, что, несмотря на то что один из коэффициентов, R или T , в (11.6) принимает отрицательные значения, условие

$$R + T = 1$$

по-прежнему выполняется. Как мы видели ранее, именно это условие обеспечивает выполнение закона сохранения энергии в процессе рассеяния.

Далее, несложно видеть, что при выполнении условия

$$k = s'' \quad (11.7)$$

формулы (11.6) имеют особенность. Возникновение этой особенности объясняется следующим образом. Асимптотический вид пространственных волновых функций $g_n(z)$ определяется выражением (10.55). При положительном знаке произведения $\mu_0 E_0$ и $s' = n$ из (10.55) получаем

$$g_{2,3}(z)|_{z \rightarrow -\infty} = \frac{\Gamma(1 - ik)\Gamma(-ik)}{\Gamma(-n - i(k - s''))\Gamma(1 + n - i(k - s''))} \exp(ikz) + i(-1)^{n+1} \frac{\operatorname{sh}(\pi s'')}{\operatorname{sh}(\pi k)} \exp(-ikz).$$

Несложно видеть, что при $k = s''$ амплитуда падающей волны обращается в нуль, а амплитуда отраженной волны становится равной единице. Таким образом, при $k = s''$ пространственные функции $g_{2,3}(z)$ должны быть выбраны в виде

$$g_{2,3}(z) = F(-ik - s^*, -ik + s^* + 1, 1 - ik, \eta) (\operatorname{ch}(\beta z))^{ik} = \begin{cases} \exp(ikz), & z \rightarrow \infty, \\ i(-1)^{n+1} \exp(-ikz), & z \rightarrow -\infty. \end{cases} \quad (11.8)$$

Вид функций $|g_{2,3}(z)|^2$ показан на рис. 11.1 для случаев $n = 1$ (*б*), 2 (*е*), 3 (*и*). Следовательно, в рассматриваемом случае пространственные волновые функции безмассовых квартаионных состояний (8.93), отвечающие собственному значению $\lambda_{2,3} = iE_0$, имеют амплитуду, равную по модулю единице во всей области пространства за исключением области, занятой полем.

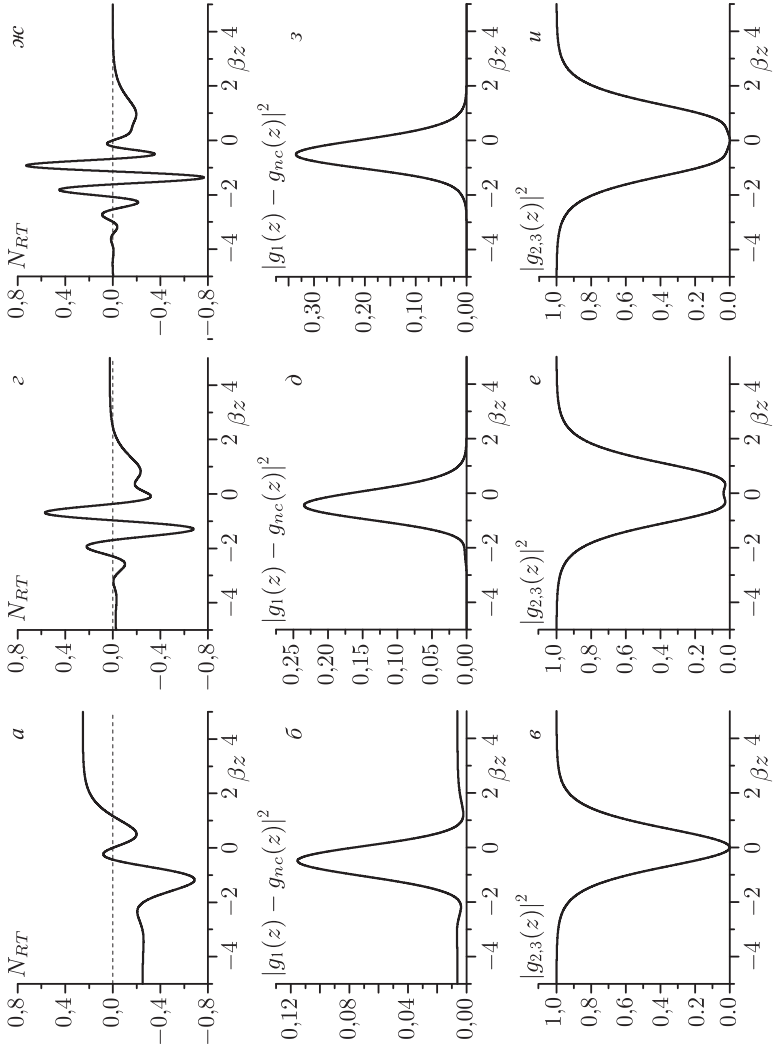


Рис. 11.1. Пространственный профиль функций $|g_{2,3}(z)|^2$ (в, е, и), $|g_1(z) - g_{inc}(z)|^2$ (б, д, з) и $N_{RT}(z)$ (а, г, ж) для случаев $n = 1$ (а, б, в), 2 (г, д, е), 3 (ж, з, и)

Отметим, что при отрицательном знаке произведения $\mu_0 E_0$ обращается в нуль амплитуда падающей волны для решений $g_{1,4}(z)$.

При выполнении условий (11.5) и (11.7) обращается в нуль амплитуда падающей волны пространственных волновых функций $g_{2,3}(z)$. Однако амплитуда падающей волны пространственных волновых функций $g_{1,4}(z)$ при этом остается конечной. Второй ряд графиков на рис. 11.1 показывает для тех же значений параметров профиль функции $|g_1(z) - g_{inc}(z)|^2$, где

$$g_{inc}(z) = (1 - \text{th}(\beta z/2)) \exp(i\kappa z)/2.$$

Функция $g_1(z)$ в области $z < 0$ является суперпозицией падающей и отраженной волн, а функция $g_{inc}(z)$ аппроксимирует волновую функцию падающей частицы в области $z < 0$. Оставшаяся часть $g_1(z) - g_{inc}(z)$ в области ненулевого электрического поля представляет собой суперпозицию отраженной и прошедшей волн. Как видно из рисунка, максимум амплитуды состояния, соответствующего суперпозиции прошедшей и отраженной волн, при указанных значениях параметров достигается в области, занятой полем.

11.1.2. Сохранение энергии. Ввиду линейности уравнения (7.2) любая суперпозиция линейно независимых решений также является решением указанного уравнения. Рассмотрим волновую функцию следующего вида:

$$\Psi(z) = C_1 \psi_1 g_1(z) + C_3 \psi_3 F(-ik - s^*, -ik + s^* + 1, 1 - ik, \eta) (2 \text{ch}(\beta z))^{ik}. \quad (11.9)$$

При выполнении условий (11.5) и (11.7) волновая функция (11.9) имеет асимптотическую форму

$$\Psi(z) = \begin{cases} C_1 \psi_1 \exp(i\kappa z) + (C_1 \psi_1 r_1^{(\text{res})} + C_3 \psi_3 (-1)^n) \exp(-i\kappa z), & z \rightarrow -\infty, \\ (C_1 \psi_1 t_1^{(\text{res})} + C_3 \psi_3) \exp(i\kappa z), & z \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

где индекс (res) указывает на выполнение резонансных условий (11.5) и (11.7), соответствующие коэффициенты имеют вид

$$r_1^{(\text{res})} = \frac{\Gamma(1+n)\Gamma(-n-i2k)\Gamma(ik)}{\Gamma(1+n+ik)\Gamma(-n-ik)\Gamma(-ik)},$$

$$t_1^{(\text{res})} = \frac{\Gamma(1+n)\Gamma(-n-i2k)}{\Gamma(1-ik)\Gamma(-ik)}.$$

Как видно, волновая функция (11.9) при выполнении резонансных условий (11.5) и (11.7) соответствует падающей волне в виде безмассового возбуждения спинорного поля, являющегося когерентной су-

перпозицией положительного и отрицательного квартионов одинаковой амплитуды:

$$\Psi_0(z) = \frac{C_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} \exp(i\kappa z) = \frac{C_1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z) + \begin{pmatrix} 0 \\ w^{(+)} \end{pmatrix} \exp(i\kappa z) \right]. \quad (11.10)$$

В свою очередь отраженная и прошедшая волны представляют собой суперпозиции положительного и отрицательного квартионных состояний различной амплитуды:

$$\Psi_r(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \left(C_1 r_1^{(\text{res})} + C_3 (-1)^n \right) \\ w^{(+)} \left(C_1 r_1^{(\text{res})} - C_3 (-1)^n \right) \end{pmatrix} \exp(-i\kappa z),$$

$$\Psi_t(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \left(C_1 t_1^{(\text{res})} + C_3 \right) \\ w^{(+)} \left(C_1 t_1^{(\text{res})} - C_3 \right) \end{pmatrix} \exp(i\kappa z).$$

Следовательно, несмотря на то что падающая волна отвечает безмассовому возбуждению материального поля, отраженная и прошедшая волны могут отвечать состоянию нейтрального спинорного поля конечной массы, поскольку

$$N_r = \bar{\Psi}_r \Psi_r = \left(C_1 C_3^* r_1^{(\text{res})} + C_1^* C_3 r_1^{(\text{res})*} \right) (-1)^n,$$

$$N_t = \bar{\Psi}_t \Psi_t = \left(C_1 C_3^* t_1^{(\text{res})} + C_1^* C_3 t_1^{(\text{res})*} \right).$$

Отметим, что коэффициенты $r_1^{(\text{res})}$ и $t_1^{(\text{res})}$ можно записать в следующем виде:

$$r_1^{(\text{res})} = i(-1)^{n+1} \frac{\Gamma(1+n)\Gamma(-n-i2k)\Gamma(ik)}{\Gamma(-ik)} \frac{\text{sh}(\pi k)}{\pi},$$

$$t_1^{(\text{res})} = i \frac{\Gamma(1+n)\Gamma(-n-i2k)\Gamma(ik)}{\Gamma(-ik)} \frac{\text{sh}(\pi k)}{\pi}.$$

Несложно видеть, что эти два коэффициента связаны соотношением

$$r_1^{(\text{res})} = (-1)^{n+1} t_1^{(\text{res})},$$

поэтому

$$N_r = -N_t.$$

Верхний ряд графиков на рис. 11.1 показывает пространственный профиль нормы волновой функции Ψ_{RT} , определяемой выражением

$$\Psi_{RT}(z) = \Psi(z) - \Psi_0(z) (1 - \text{th}(\beta z/2)),$$

для тех же значений $n = 1$ (а), 2 (б), 3 (в).

Несложно видеть, что в процессе резонансного рассеяния безмассового возбуждения (11.10) энергия материального поля сохраняется, поскольку энергия падающей волны

$$EN_0 = 0$$

равна энергии рассеянных волн

$$E(N_r + N_t) = 0.$$

Во избежание недоразумений отметим, что в последних формулах мы опустили сомножитель E/m_0c^2 , поскольку нормировочные множители $C_{1,3} \sim \sqrt{m_0c^2/E}$. Поскольку правая часть последних выражений равна нулю, то явный вид нормировочных множителей на интерпретацию явлений не влияет.

Следует отметить, что выполняется не только закон сохранения энергии, но и закон сохранения потока. Действительно, плотность потока падающих частиц равна нулю, поскольку

$$\mathbf{j}_0 = \mathbf{e}_z \frac{\hbar\kappa}{m_0} \bar{\Psi}_0 \Psi_0 = 0,$$

а плотности потока отраженных и прошедших частиц определяются выражениями

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_r &= -\mathbf{e}_z \frac{\hbar\kappa}{m_0} \bar{\Psi}_r \Psi_r = -\mathbf{e}_z \frac{\hbar\kappa}{m_0} \left(C_1 C_3^* r_1^{(\text{res})} + C_1^* C_3 r_1^{(\text{res})*} \right) (-1)^n, \\ \mathbf{j}_t &= \mathbf{e}_z \frac{\hbar\kappa}{m_0} \bar{\Psi}_t \Psi_t = \mathbf{e}_z \frac{\hbar\kappa}{m_0} \left(C_1 C_3^* t_1^{(\text{res})} + C_1^* C_3 t_1^{(\text{res})*} \right). \end{aligned}$$

Таким образом, получаем: $\mathbf{j}_r = \mathbf{j}_t$, и интегральный поток рассеянных частиц через границы обращается в нуль:

$$\oint \mathbf{j} d\mathbf{S} = - \oint_{z \rightarrow -\infty} \mathbf{e}_z \mathbf{j}_r d\mathbf{S} + \oint_{z \rightarrow \infty} \mathbf{e}_z \mathbf{j}_t d\mathbf{S} = 0.$$

Поскольку плотность потока античастиц противоположна плотности потока частиц, то сохранение потока можно интерпретировать следующим образом. При резонансном воздействии безмассового возбуждения (11.10) материальное поле во всем пространстве движется в одном и том же направлении, а проходя через область ненулевого поля, все античастицы преобразуются в частицы. Если в состоянии античастицы находится прошедшая волна, то указанная интерпретация перекликается с интерпретацией реакций с участием зеркальных частиц. Однако подробнее на обсуждении этой аналогии мы остановимся чуть позже.

Отметим также, что в отсутствие падающей волны вида (11.10), т.е. при $C_1 = 0$, плотность потока, так же как и энергия поля, обращается в нуль во всем пространстве. В свою очередь решение при коэффициенте C_3 в (11.9) равно $g_3(z)/t_3$, где коэффициент t_3 при $s' = n$ и $k \rightarrow s''$ стремится к бесконечности. Как несложно догадаться на основе анализа вышеприведенных формул, вблизи резонанса ам-

плитуды населенности положительного и отрицательного квартионных состояний рассеянного поля будут существенно зависеть от величины отстройки от резонанса.

11.1.3. Анализ резонансных условий. При выполнении соотношений (11.5) и (11.7) амплитуда падающей волны пространственных волновых функций $g_{2,3}(z)$ обращается в нуль. Эти соотношения определяют условия строгого резонанса. Соотношение (11.5) накладывает условия на напряженность электрического поля и размеры пространственной области его распределения, которые выражаются с помощью единого параметра

$$F = \frac{2m_0\mu_0 E_0}{\hbar^2 \beta^2}. \quad (11.11)$$

Для величины параметра F , отвечающего соотношению (11.5), получаем

$$F_n = (2n + 1)\sqrt{n(n + 1)}. \quad (11.12)$$

Соотношение (11.7) определяет резонансную энергию падающей частицы E_n или величину ее волнового вектора κ_n ,

$$\kappa_n = \beta\sqrt{n(n + 1)}. \quad (11.13)$$

Из (11.12) и (11.13) следует, что

$$\mu_0 E_0 \approx \frac{n^2 \hbar^2 \beta^2}{m_0}, \quad \kappa_n \approx n\beta.$$

В частности, при $n \approx 1$ энергия электродипольного взаимодействия $\mu_0 E_0$ должна быть больше удвоенной кинетической энергии частицы $\hbar^2 \beta^2 / 2m_0$, локализованной в области ненулевого значения поля, а величина волнового вектора — порядка обратной ширины области ненулевого значения электрического поля: $\kappa_1 \approx \beta = l^{-1}$. Как видно из рис. 11.1, с ростом отношения κ_n / β вероятность рождения античастицы в отраженном поле падает.

Как следует из формул (11.4)–(11.6), коэффициенты отражения и прохождения могут менять знак не только при строгом выполнении условий (11.5) и (11.7), но и в некоторой области вблизи указанных значений. На рис. 11.2–11.4, *а* и *б* показаны энергетические зависимости коэффициентов отражения и прохождения, определяемых формулами (10.62), при значении n в (11.12), равном $n = 0,6$ (рис. 11.2), $0,9$ (рис. 11.3), $0,99$ (рис. 11.4). Кривые на рис. 11.2–11.4, *в* показывают квадраты амплитуд положительного (сплошная кривая) и отрицательного (штриховая кривая) квартионных состояний в рассеянном поле. Кривые на рис. 11.2–11.4, *г* показывают проекции вектора электрической поляризации на направление рассеивающего электрического поля. Из рисунков видно, что с приближением значения параметра n в (11.12) к резонансному значению $n = 1$ профили коэффициентов отражения и прохождения принимают S -образный вид, характерный для резонансных процессов. При этом амплитуды квартионных состояний,

а с ними и величина вектора электрической поляризации резко возрастают. Таким образом, указанные резонансы являются quartiонными резонансами.

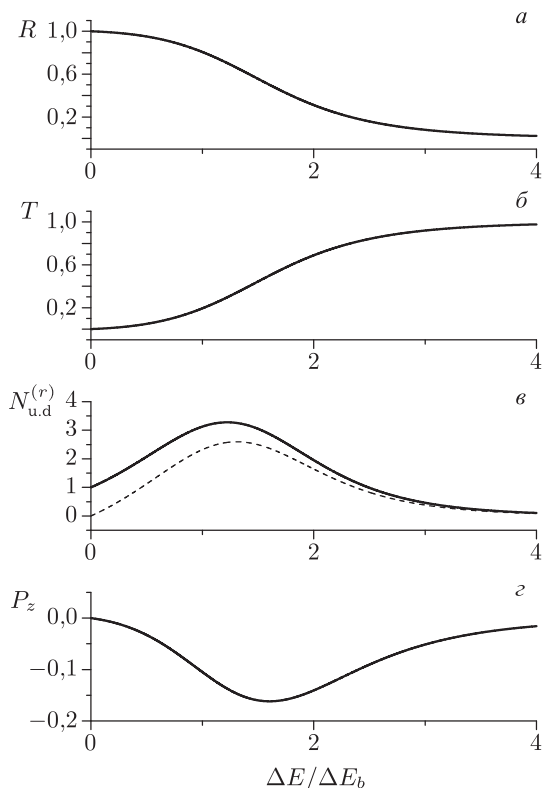


Рис. 11.2. Энергетические спектры коэффициентов отражения R (а), прохождения T (б), чисел заполнения верхних (сплошная кривая, в) и нижних (штриховая кривая, в) quartiонных состояний и продольной проекции вектора электрической поляризации P_z (г) для значения параметра n , входящего в условие (11.5), равного $n = 0,6$

Как мы отмечали в предыдущей главе, соотношение (10.63) является следствием закона сохранения разности чисел заполнения положительных и отрицательных quartiонных состояний в процессе рассеяния. Как видно из представленных иллюстраций, каждое из чисел заполнения при этом может не просто превышать единицу, а быть больше единицы на несколько порядков величины.

Природа quartiонных резонансов связана с тем, что резонансные условия (11.5) и (11.7) определяют собственные моды спинорного материального поля в заданном внешнем электрическом поле, когда два

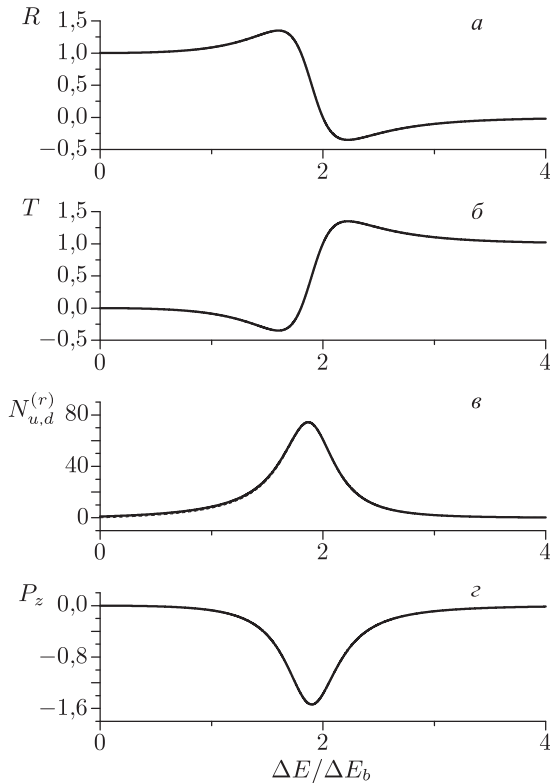


Рис. 11.3. Энергетические спектры коэффициентов отражения R (а), прохождения T (б), чисел заполнения верхних (сплошная кривая, в) и нижних (штриховая кривая, в) квартионных состояний и продольной проекции вектора электрической поляризации P_z (г) для значения параметра n , входящего в условие (11.5), равного $n = 0,9$

из четырех линейно независимых решений (11.1) отвечают стационарному пространственному распределению волновой функции, имеющему ненулевую амплитуду во всей области пространства за исключением области ненулевого электрического поля. Несмотря на конечность величины амплитуды стационарных распределений, собственные моды отвечают нулевому потоку материального поля через границы бесконечно большого объема, что следует из асимптотической формы волновой функции (11.8). Собственные моды отвечают также и нулевой энергии материального поля, что следует из свойств ортогональности биспиноров ψ_n , определяемых соотношениями (8.19). Состояния, отвечающие двум оставшимся линейно независимым решениям в (11.1), не являются при этом стационарными и взаимодействуют со стационарными модами, что опять же обусловлено свойствами ортогональ-

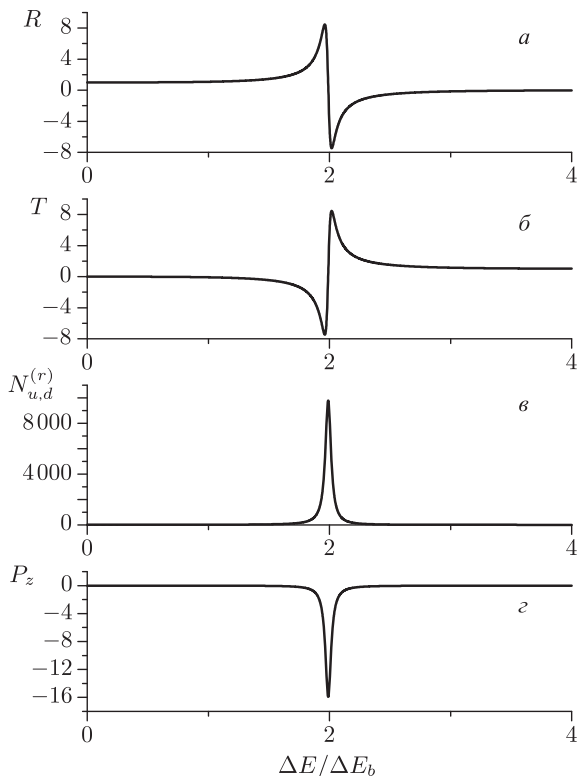


Рис. 11.4. Энергетические спектры коэффициентов отражения R (а), прохождения T (б), чисел заполнения верхних (сплошная кривая, в) и нижних (штриховая кривая, которая в использованном на рисунке масштабе совпадает со сплошной, в) квартионных состояний и продольной проекции вектора электрической поляризации P_z (г) для значения параметра n , входящего в условие (11.5), равного $n = 0,99$

ности (8.19). Для каждого из состояний поляризации квартионные состояния, отвечающие частицам конечной энергии, являются суперпозицией резонансной и нерезонансной мод, поэтому резкое возрастание амплитуд квартионных состояний вблизи резонанса обусловлено тем, что нерезонансная мода лишь возмущает стационарное распределение, уже существующее во всем пространстве. Это возмущение тем сильнее, чем ближе энергия падающей частицы к энергии соответствующего резонанса.

Замечания и выводы

1. Любое из парциальных решений в (11.1) при любых значениях параметров также является когерентной суперпозицией положительного и отрицательного квартионов одинаковой амплитуды. Однако

в отличие от когерентной суперпозиции (11.9) для каждого из парциальных состояний в (11.1) получаем $\overline{\psi}_n \psi_n g_n^*(z) g_n(z) = 0$ при всех значениях z . Как следует из приведенного анализа, возможность распада безмассового квартиона на положительный и отрицательный квартионы является следствием связи четного и нечетного по отношению к оператору γ_5 безмассовых квартионов, отвечающих одному и тому же значению σ , которая обусловлена их свойствами, определяемыми условиями ортогональности (8.19).

2. Во введении к настоящей главе мы отмечали, что существует аналогия между задачами о распространении оптического излучения в пространственно неоднородных средах и задачами о взаимодействии материального поля с пространственно неоднородным электромагнитным полем. Действительно, как видно из вышеприведенного анализа, условия (11.5) и (11.7) эквивалентны условиям, определяющим режим волноводного распространения света. Однако вместе с тем видно, что указанная аналогия является неполной. Под волноводным режимом распространения электромагнитного излучения обычно понимается ситуация, когда амплитуда электромагнитной волны отлична от нуля внутри волновода и равна нулю вне его. Как видно из рис. 11.1, в рассматриваемом случае мы имеем прямо противоположную ситуацию: амплитуда каждой из парциальных волн $g_{2,3}(z)$ близка к нулю в области ненулевого электрического поля и равна единице вне указанной области. Естественно, что аналогичная ситуация возможна и для электромагнитного поля. Однако в теории электромагнитных волн этот режим не считается волноводным, поскольку энергия электромагнитного поля, находящегося вне волновода, является в этом случае бесконечной. В теории спинорного материального поля, ввиду ортогональности биспиноров ψ_2 и ψ_3 , энергия материального поля, находящегося вне «волновода», равна нулю.

3. Из формул гл. 10 следует, что граничная энергия отражения нейтрона электрическим полем определяется равенством (10.64). При выполнении условия (11.5) это соотношение принимает вид (11.7). Поэтому приведенное выше обсуждение дает объяснение резкого возрастания чисел заполнения квартионных состояний вблизи порога отражения, на которое мы обращали внимание уже в предыдущей главе.

11.2. Резонансное рассеяние заряженных частиц

Обратимся теперь к анализу задачи о рассеянии заряженной частицы пространственно неоднородным электрическим полем, проведенному в гл. 9.

11.2.1. Положительная потенциальная ступенька. Итак, мы видели, что в случае нейтральных частиц резонансное рассеяние возникает в области волноводных мод материального поля. Решения зада-

чи о рассеянии заряженных частиц электрическим полем вида

$$\mathbf{E}(z) = \frac{\mathbf{E}_0}{\operatorname{ch}^2(\beta z)} \quad (11.14)$$

весьма близки к соответствующим решениям для случая нейтральных частиц. В этом легко убедиться, сравнив формулы гл. 9 и раздела 10.3. Однако между этими двумя задачами имеется и существенное различие, состоящее в том, что в случае заряженных частиц задача перестает быть симметричной относительно замены $z \rightarrow -z$, поскольку электрическое поле вида (11.14) приводит к скачку потенциальной энергии частицы, равному $U_0 = -2q_0 E_0/\beta$.

Асимптотический вид волновых функций задачи о рассеянии заряженной частицы электрическим полем вида (11.14) определяется выражением (9.10):

$$g_n(z)|_{z \rightarrow \infty} = \frac{\Gamma(1-ik_2)\Gamma(-ik_1)}{\Gamma(1+s_n-i(k_1+k_2)/2)\Gamma(-s_n-i(k_1+k_2)/2)} \exp(ik_1\beta z) + \\ + \frac{\Gamma(1-ik_2)\Gamma(ik_1)}{\Gamma(1+s_n+i(k_1-k_2)/2)\Gamma(-s_n+i(k_1-k_2)/2)} \exp(-ik_1\beta z), \quad (11.15)$$

где

$$k_1 = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c \beta}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{(E - U_0)^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c \beta}, \quad (11.16) \\ s_n = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - \left(\frac{U_0}{\hbar c \beta}\right)^2} - 2\lambda_n \gamma \frac{U_0}{\hbar c \beta} - 1 \right).$$

Собственные значения λ_n совпадают с собственными значениями задачи о рассеянии нейтральной частицы и имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \mp i, \quad \lambda_{3,4} = \pm i.$$

Следовательно, вне области полного отражения условия обращения в нуль первого слагаемого в (11.15) для решений $g_{2,3}(z)$ имеют теперь вид

$$s' = n, \quad (11.17)$$

$$s'' = \frac{k_1 + k_2}{2}. \quad (11.18)$$

Решение уравнения (11.18) имеет вид

$$E_{1,2} = \frac{U_0 (S^2 - U_0^2) \pm S \sqrt{(S^2 - U_0^2)(4m_0^2 c^4 + S^2 - U_0^2)}}{2(S^2 - U_0^2)}, \quad (11.19)$$

где мы ввели обозначение

$$S = 2\hbar c \beta s''.$$

Напомним, что параметр γ в выражении (11.16) есть гиромагнитное отношение $\gamma = \mu_0/\mu_B$, равное отношению величины магнетона частицы μ_0 к величине магнетона Бора μ_B . В случае $\gamma = 1$ параметр $s_{2,3}$ принимает вид

$$s_{2,3} = -i \frac{U_0}{2\hbar c \beta} = -i s''.$$

Таким образом, в рамках теорий, в которых полагается, что магнитный момент равен магнетону Бора, уравнение (11.18) не имеет решений, отвечающих конечной величине энергии налетающей частицы, поскольку знаменатель выражения (11.19) при выполнении последнего соотношения обращается в нуль. Следовательно, процессов рождения античастиц в рамках таких теорий в принципе не возникает. Напротив, в случае $\gamma > 1$ мы получаем конечные значения величины резонансной энергии.

Как показал анализ, основанный на тригонометрическом соотношении (11.4), и как следует из формул (9.22) и (9.23), изменение знака коэффициентов отражения и прохождения происходит не только при строгом выполнении условий (11.17)–(11.18), также и вблизи указанных значений. Как мы уже отмечали выше и как следует из общих соображений, процессы рождения античастиц происходят вблизи границы области полного отражения, где амплитуды отраженной и прошедшей волн имеют сопоставимые значения, поэтому величины $E_{1,2}$, определяемые выражением (11.19), должны быть близки к величине $E_{1,2} \approx m_0 c^2 + U_0$. Используя (11.16), из последнего соотношения мы получаем для величины гиромагнитного отношения следующее выражение:

$$\gamma = 2 \sqrt{1 + 16 \left(\frac{k_C}{\beta} \right)^2 + 3u_0^2 + 2 \frac{k_C}{\beta u_0} + 14 \frac{k_C u_0}{\beta}}, \quad (11.20)$$

где $k_C = m_0 c / \hbar$, следовательно, отношение k_C/β — отношение ширины области, занятой полем l , к комптоновской длине волны λ_C :

$$\frac{k_C}{\beta} = \frac{l}{\lambda_C}.$$

Такое отношение нам уже встречалось в теории зеркальных частиц. В свою очередь параметр u_0 можно представить в виде

$$u_0 = \frac{U_0}{\hbar c \beta} = \frac{U_0}{m_0 c^2} \frac{k_C}{\beta}.$$

Учитывая последние соотношения из (11.20) несложно видеть, что реаллистичные значения гиромагнитного отношения, составляющие несколько единиц, достигаются в случае $k_C \ll \beta$.

Таким образом, мы видим, что условие малости пространственной ширины области, занятой полем, по сравнению с комптоновской длиной волны является общим для процессов рождения как зеркальных частиц, так и античастиц. Отличия этих процессов состоят в следую-

щем. Во-первых, для рождения античастиц в рассеянном поле не требуется, чтобы величина потенциального барьера превышала удвоенную массу покоя. Во-вторых, рождение античастиц имеет место только тогда, когда гиромагнитное отношение больше единицы: $\gamma > 1$.

На рис. 11.5 представлены энергетические спектры отражения и прохождения для частиц, обладающих гиромагнитным отношением $\gamma = 1,0$ (а, б); 1,5 (в, г); 2,0 (д, е). Высота потенциального барьера была выбрана равной $U_0 = 4m_0c^2$ (что совпадает с высотой барьера для кривых на рис. 9.1, в и г), а отношение $k_C/\beta = 0,05$. Как видно из рисунков, в области $0 \leq \Delta E \leq U_0 - 2m_0c^2$ происходят процессы рождения зеркальных частиц, а в области выше второго порога полного отражения, $\Delta E \geq U_0$, при $\gamma > 1$ возникает S-образная зависимость коэффициентов отражения и прохождения, характерная для резонансных процессов.

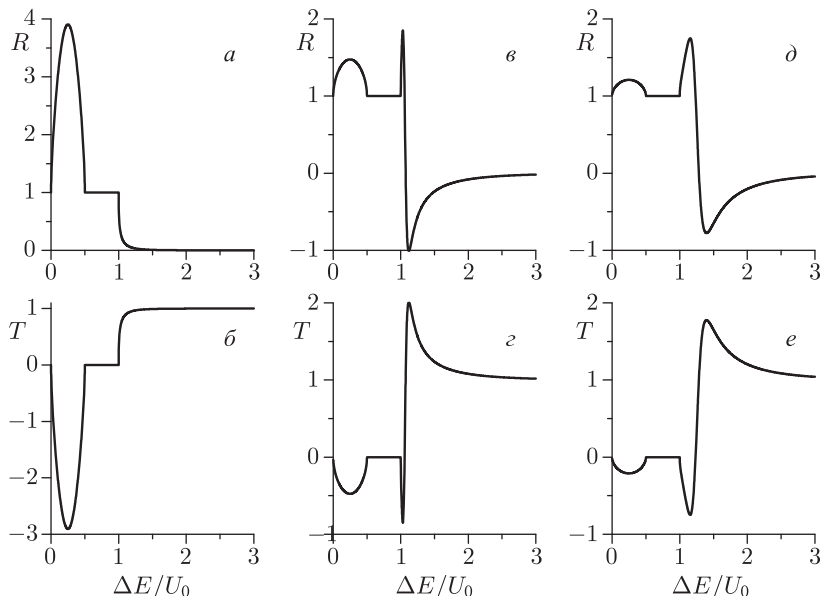


Рис. 11.5. Энергетические спектры коэффициентов отражения R и прохождения T для частиц, обладающих гиромагнитным отношением $\gamma = 1,0$ (а, б); 1,5 (в, г); 2,0 (д, е). Высота потенциального барьера была выбрана равной $U_0 = 4m_0c^2$, а отношение $k_C/\beta = 0,05$

Отметим попутно, что кривые на рис. 9.1, д и е также относятся к случаю частицы, обладающей гиромагнитным отношением $\gamma = 2,0$, однако они рассчитаны для значения параметра $k_C/\beta = 1,0$. Из сравнения этих двух рисунков следуют два важных вывода. Во-первых, при $k_C/\beta = 1$ зеркальная частица имеет положительную норму, а при $k_C/\beta = 0,05$ — отрицательную. Следовательно, знак нормы зеркальной

частицы зависит не только от величины магнетона частицы, но и от параметров профиля рассеивающего поля. Во-вторых, при $k_C/\beta = 1$ процессов резонансного рассеяния не происходит, а при $k_C/\beta = 0,05$ они отчетливо наблюдаются. Резонансы рассеяния наблюдаются при выполнении двух условий, (11.17) и (11.18). Точно так же два условия должны быть выполнены для реализации реакций с участием зеркальных частиц. В обоих случаях требуемые условия можно представить в виде области на плоскости (U_0, E_0) , где E_0 — напряженность электрического поля, связанная с высотой потенциального барьера соотношением $U_0 = -2q_0 E_0/\beta$. Как видно, области реализации условий для прохождения реакций с участием зеркальных частиц и античастиц не совпадают, или, точнее, эти области практически не перекрываются.

На рис. 11.6 представлены энергетические спектры отражения и прохождения для частицы, обладающей гиромагнитным отношением $\gamma = 2,0$, при различной высоте потенциального барьера $U_0 = 0,5m_0c^2$ (а, б); $1,0m_0c^2$ (в, з); $2,0m_0c^2$ (д, е) и той же, что и на предыдущем рисунке, величине отношения $k_C/\beta = 0,05$. Несложно видеть, что относительная ширина резонанса $\Delta E/U_0$ немонотонно зависит от высоты потенциального барьера.

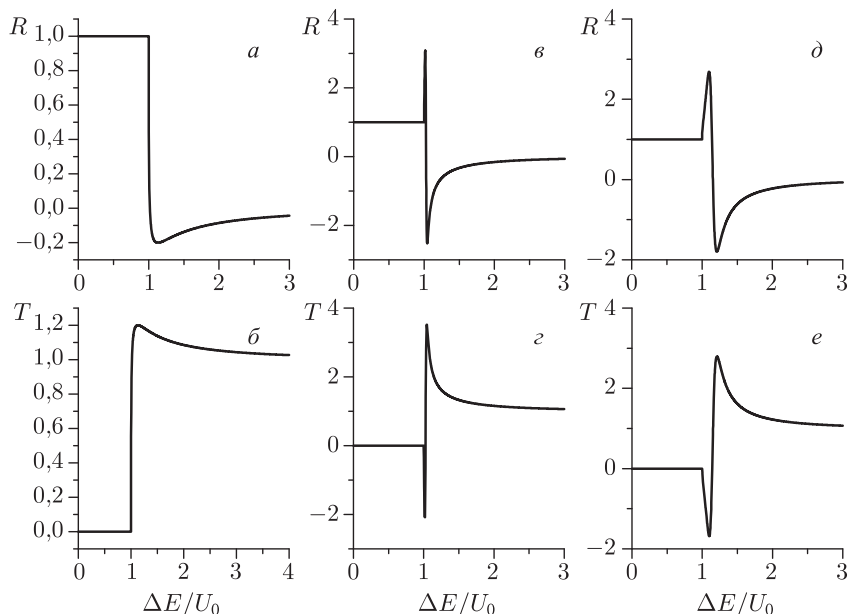


Рис. 11.6. Энергетические спектры коэффициентов отражения R и прохождения T для частицы, обладающей гиромагнитным отношением $\gamma = 2,0$, при различной высоте потенциального барьера $U_0 = 0,5m_0c^2$ (а, б); $1,0m_0c^2$ (в, з); $2,0m_0c^2$ (д, е) и той же, что и на рис. 11.5, величине отношения $k_C/\beta = 0,05$

11.2.2. Отрицательная потенциальная ступенька. Процессы резонансного рассеяния происходят в области выше верхнего порога области полного отражения. Следовательно, из общих соображений ясно, что резонансные реакции, в отличие от процессов, связанных с рождением зеркальных частиц, будут происходить и для частиц, обладающих противоположным зарядом. Возникающие отличия связаны лишь с тем, что резонансы возникают в области $\Delta E \approx 0$. Действительно, рис. 11.7–11.9 иллюстрируют специфику резонансного рассеяния противоположно заряженных частиц на том же профиле электрического поля (11.14). На рис. 11.7 показаны энергетические спектры коэффициентов отражения и прохождения, а также продольной проекции вектора электрической поляризации отраженной частицы для различных значений пространственной ширины области ненулевого значения напряженности электрического поля $k_C/\beta = 10$ (а, б, в); 0,1 (г, д, е); 0,01 (ж, з, и). Потенциальная ступенька является в этом случае не положительной, а отрицательной ($U_0 < 0$), однако ее высота выбрана

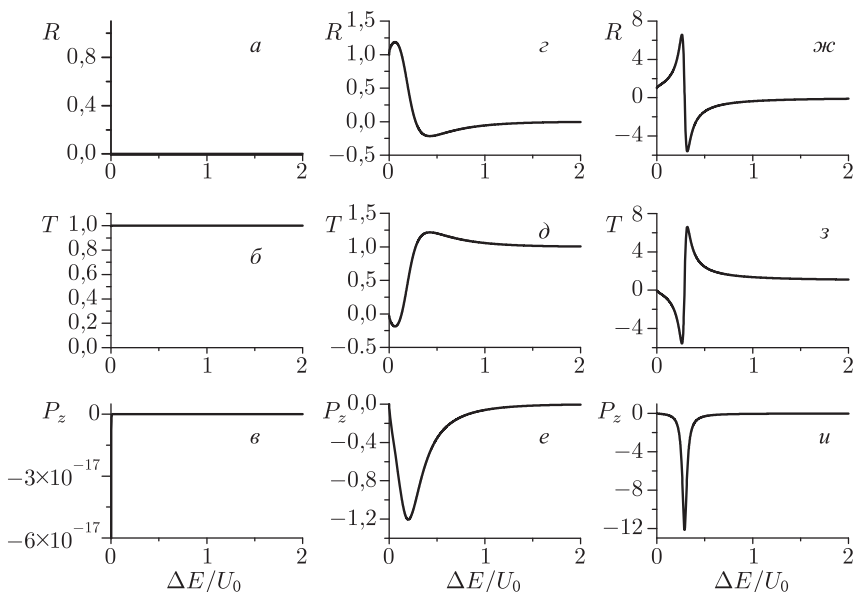


Рис. 11.7. Энергетические спектры коэффициентов отражения R и прохождения T и продольной проекции вектора электрической поляризации P_z отраженной частицы для различных значений пространственной ширины области ненулевого значения напряженности электрического поля $k_C/\beta = 10$ (а, б, в); 0,1 (г, д, е); 0,01 (ж, з, и). Потенциальная ступенька является в этом случае не положительной, а отрицательной ($U_0 < 0$), а ее высота выбрана равной $|U_0| = 4m_0c^2$, т. е. значению, совпадающему по величине со значением, которое мы часто использовали в предыдущих иллюстрациях. Величина гиромагнитного отношения частицы положена равной $\gamma = \mu_0/\mu_B = 2$

равной $|U_0| = 4m_0c^2$, т.е. значению, совпадающему по величине со значением, которое мы часто использовали в предыдущих иллюстрациях. Величина гиромагнитного отношения частицы положена равной $\gamma = \mu_0/\mu_B = 2$. При $k_C/\beta \ll 1$ возникают характерные для резонансов S-образные зависимости коэффициентов отражения и прохождения. Как следует из вида нижних кривых, представленных на этом рисунке, природа резонансов связана с резонансным возрастанием величины вектора электрической поляризации, характеризующего состояние спирного материального поля.

На рис. 11.8 показана зависимость энергетических спектров отражения и прохождения от величины гиромагнитного отношения частицы. Параметры потенциальной ступеньки совпадают с аналогичными параметрами, использованными при расчете кривых на рис. 11.5: $U_0 = 4m_0c^2$ и $k_C/\beta = 0,05$. Как видно, получающиеся зависимости полностью аналогичны зависимостям, представленным на рис. 11.5, а, отличие состоит лишь в сдвиге резонанса в область $\Delta E \approx 0$.

На рис. 11.9 показаны зависимости энергетических спектров отражения и прохождения от высоты потенциальной ступеньки $|U_0| = 0,5$ (а, б, в); 1,0 (г, д, е); 2,0 (ж, з, и) для случая $k_C/\beta = 0,05$, $\gamma = \mu_0/\mu_B = 2$. Несложно видеть, что, так же как и в предыдущем

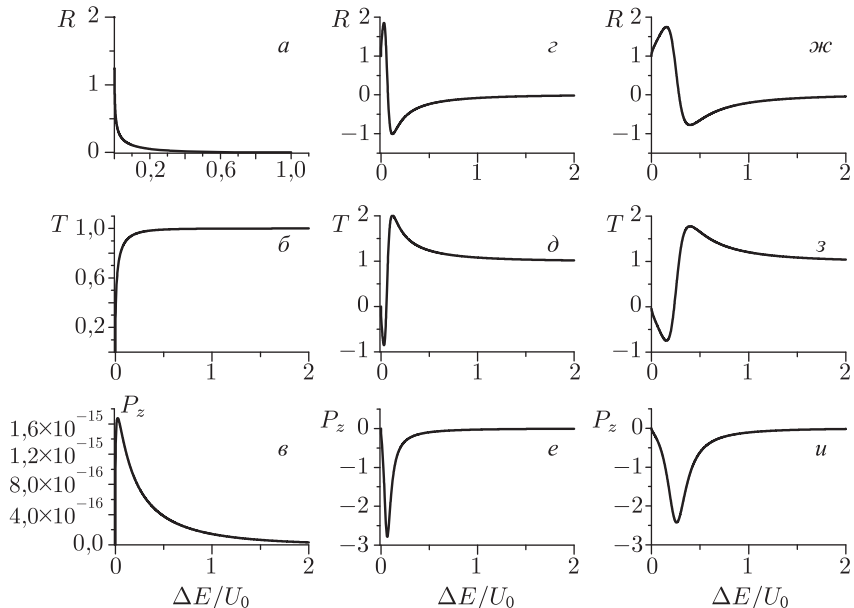


Рис. 11.8. Энергетические спектры коэффициентов отражения R и прохождения T и продольной проекции вектора электрической поляризации P_z отраженной частицы для различных значений гиромагнитного отношения $\gamma = 1$ (а, б, в); 1,5 (г, д, е); 2,0 (ж, з, и) в случае $U_0 = 4m_0c^2$ и $k_C/\beta = 0,05$

случае, все получающиеся зависимости аналогичны зависимостям для частицы противоположного заряда, представленным на рис. 11.6, со сдвигом резонанса в область $\Delta E \approx 0$.

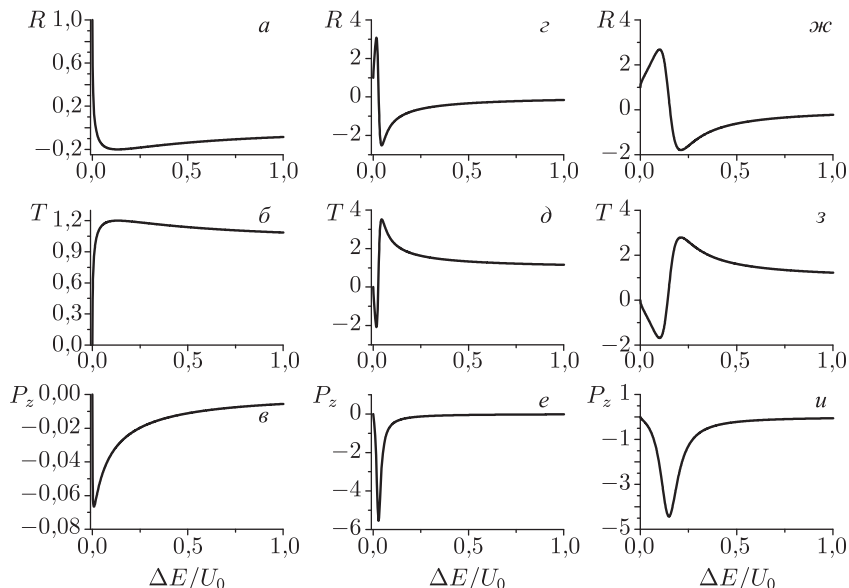


Рис. 11.9. Энергетические спектры коэффициентов отражения R и прохождения T и продольной проекции вектора электрической поляризации P_z отраженной частицы для различных значений высоты потенциальной ступеньки $|U_0| = 0,5$ (a , $б$, $в$); $1,0$ (z , $д$, $е$); $2,0$ ($ж$, $з$, $и$) для случая $k_C/\beta = 0,05$, $\gamma = \mu_0/\mu_B = 2$

11.2.3. Выводы

1. Условие малости пространственной ширины области ненулевого значения поля по сравнению с комптоновской длиной волны является необходимым условием появления реакций, приводящих к появлению заряженных античастиц в рассеянном поле. Это условие является общим условием реализации процессов с изменением числа частиц при рассеянии заряженных частиц электрическим полем.

2. Резонансные условия для нейтральной частицы определяются выражениями (11.5) и (11.7), а для заряженной частицы — выражениями (11.17) и (11.18). Сравним эти условия. Параметр F , определяемый соотношением (11.11), можно записать в следующем виде:

$$F = \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{\mu_B} \frac{U_0}{m_0 c^2} \frac{k_C}{\beta},$$

где мы чисто формально воспользовались связью между напряженностью электрического поля и высотой потенциальной ступеньки, которая

определяется выражением (9.1). Согласно соотношению (11.12) характерная величина резонансного значения параметра должна быть порядка нескольких единиц, во всяком случае для низкоэнергетических резонансов. Условие (11.13) определяет резонансное значение энергии налетающей частицы. Это выражение можно записать в виде

$$\Delta E_n = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\beta}{k_C}\right)^2 n(n+1)} - 1 \right).$$

С другой стороны, энергетическая граница области полного отражения определяется условием (10.64), которое можно записать в виде

$$\Delta E_b = \frac{\mu_0 E_0}{2} \frac{4F}{\sqrt{1 + (4F)^2 + 1}}.$$

Приведенные соотношения показывают, что условие $k_C \ll \beta$ не является необходимым условием рождения античастиц нейтрального материального поля. Следовательно, состояния частиц нейтрального материального спинорного поля распадаются на частицу и античастицу при взаимодействии с электрическим полем гораздо меньшей напряженности, чем это имеет место для частиц спинорного поля, характеризующихся конечным зарядом q_0 и приблизительно такими же значениями материальных параметров m_0 и μ_0 . С учетом статистических закономерностей, присущих окружающему нас миру, это позволяет говорить о том, что состояния нейтрального спинорного материального поля являются менее устойчивыми, т.е. более склонными к распаду или взаимным преобразованиям, чем состояния спинорного материального поля, характеризующегося конечным зарядом.

3. Менее строгие требования к величине параметра k_C/β для осуществления реакций резонансного рассеяния нейтральных спинорных частиц можно также продемонстрировать следующим образом. Как показывают результаты предыдущего рассмотрения, условия резонансного рассеяния реализуются вблизи границы области полного отражения. Граничное значение энергии налетающей нейтральной частицы, определяемое выражением (10.64), можно записать в виде

$$\frac{\Delta E_b}{m_0 c^2} = \frac{\beta^2}{16k_C^2} \left(\sqrt{1 + (4F)^2} - 1 \right) = \frac{\beta^2}{16k_C^2} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{2\mu_0}{\mu_V} \frac{U_0}{m_0 c^2} \frac{k_C}{\beta}\right)^2} - 1 \right).$$

Как видно, при $U_0 < m_0 c^2$ граничная энергия от величины указанного параметра не зависит. Иллюстрация указанного поведения представлена на рис. 11.10, где показаны в сравнении энергетические спектры отражения и продольная проекция вектора электрической поляризации отраженной волны для случаев $k_C/\beta = 100$ (сплошные кривые), 0,1 (штриховые кривые) для тех же значений параметра n в (11.12), что и на рис. 11.2–11.4: $n = 0,6$ (а, б); 0,9 (в, г); 0,99 (д, е). Как видно, изменение величины параметра k_C/β на три порядка не меня-

ет резонансных значений коэффициентов отражения, прохождения и электрической поляризации. Происходит лишь сдвиг границы области полного отражения, величина которого согласуется с вышеприведенными формулами.

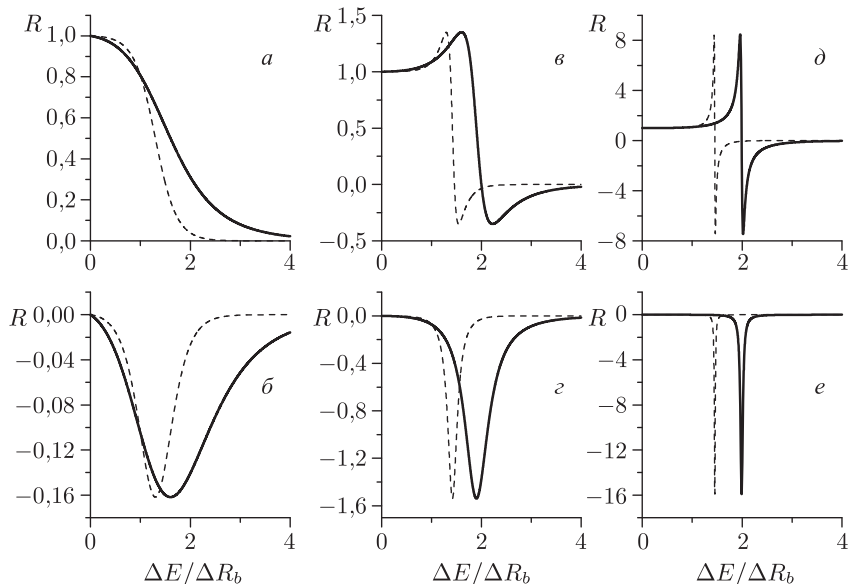


Рис. 11.10. Энергетические спектры коэффициентов отражения R и продольной проекции вектора электрической поляризации P_z отраженной частицы для различных значений величины параметра $n = 0,6$ (a , $б$); $0,9$ ($в$, $г$); $0,99$ ($д$, $е$). Величина отношения k_C/β равна: 100 (сплошные кривые), $0,1$ (штриховые кривые)

4. Как видно из рис. 11.2–11.10, резонансные зависимости коэффициентов отражения и прохождения имеют характерный S-образный вид: в низкоэнергетической области резонанса рождаются античастицы в прошедшем поле, а в высокочастотной — в отраженном. Вместе с тем, как мы отмечали в предыдущих главах, коэффициенты отражения и прохождения при рассеянии как заряженной, так и нейтральной частиц электрическим полем не зависят от направления вектора магнитной поляризации падающей частицы. Следовательно, направление вылета античастицы не зависит от направления спина падающей частицы, а лишь от ее энергии.

5. Как видно из рис. 11.2–11.10, появление античастиц в отраженном или прошедшем поле определяется знаком производной dP_z/dE , указанная зависимость позволяет дать последовательную интерпретацию широкому кругу явлений, которые связывают с эффектами несохранения четности.

11.3. Прямоугольный профиль поля

Проведенное выше рассмотрение показало, что если в случае скалярных полей отрицательная вероятность указывает на участие в процессе рассеяния зеркальных частиц, то в случае спинорных полей отрицательная вероятность может быть связана с рождением как зеркальных частиц, так и античастиц. Общим условием осуществления реакций, приводящих к изменению числа частиц в процессе рассеяния заряженных частиц электрическим полем, является условие малости пространственной ширины потенциального барьера по сравнению с комптоновской длиной волны. Это условие накладывает ограничения на пространственные размеры области ненулевого значения напряженности поля. Однако если для реакций, протекающих с участием зеркальных частиц, возникают ограничения и на величину скачка потенциальной энергии (a следовательно, и на величину напряженности поля), то для осуществления реакций, приводящих к рождению античастиц, потенциальная ступенька, как мы видели выше, может быть даже отрицательной. Более того, процессы рождения античастиц имеют место и при рассеянии нейтральной частицы электрическим полем.

С физической точки зрения наиболее яркая черта квартионных резонансов состоит в том, что состояния материального поля в виде частицы и античастицы становятся в этом случае пространственно разделенными, т. е. при рассеянии частицы появляется возможность наблюдения античастицы как отдельного состояния материального поля. Тот факт, что условия квартионных резонансов не зависят от величины и знака заряда, свидетельствует о фундаментальности явления и позволяет связать его природу со структурными свойствами спинорных материальных полей.

Базируясь на указанной общности различных с физической точки зрения процессов рассеяния, мы можем существенно упростить математическую модель, используемую для дальнейшей интерпретации явления, и обратиться к задаче о рассеянии нейтральной частицы стационарными электрическими и магнитными полями, имеющими прямоугольный профиль. Такой характер изложения отчасти противоположен тому, который мы использовали в гл. 5, однако, как мы увидим, для этого есть определенные основания.

11.3.1. Общее решение. Итак, рассмотрим задачу о рассеянии нейтральной частицы стационарными пространственно неоднородными электрическими и магнитными полями, имеющими прямоугольный профиль:

$$\mathbf{E}(z) = \begin{cases} \mathbf{E}_0, & z \in [0, l], \\ 0, & z \notin [0, l], \end{cases} \quad \mathbf{B}(z) = \begin{cases} \mathbf{B}_0, & z \in [0, l], \\ 0, & z \notin [0, l]. \end{cases}$$

Как было показано в гл. 8, общее положительно частотное решение уравнения (7.2) представляет собой сумму следующего вида:

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 \psi_n g_n(z),$$

где ψ_n — ортогональные биспиноры (8.18), отвечающие собственным значениям

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 - i\mathbf{E}_0)^2}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 + i\mathbf{E}_0)^2}, \quad (11.21)$$

а пространственные волновые функции $g_n(z)$ удовлетворяют уравнениям

$$\frac{d^2 g_n(z)}{dz^2} + \kappa^2 g_n(z) = -a_n g_n(z), \quad (11.22)$$

где

$$\kappa^2 = \frac{E^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2}, \quad a_n = \frac{2m_0 \mu_0 \lambda_n}{\hbar^2}.$$

Решение уравнений (11.22) имеет вид

$$g_n(z) = \begin{cases} A_n \exp(ikz) + B_n \exp(-ikz), & z < 0, \\ C_n \exp(ik_n z) + D_n \exp(-ik_n z), & 0 \leq z \leq l, \\ E_n \exp(ikz), & z > l, \end{cases} \quad (11.23)$$

где

$$k_n = \sqrt{\kappa^2 + a_n}.$$

Несложно видеть, что коэффициенты A_n определяют состояние падающей частицы, а остальные коэффициенты определяются из условий непрерывности волновой функции и ее производной в точках $z = 0$ и $z = l$:

$$\begin{aligned} A_n + B_n &= C_n + D_n, & \kappa(A_n - B_n) &= k_n(C_n - D_n), \\ C_n \exp(ik_n l) + D_n \exp(-ik_n l) &= E_n \exp(ikl), & & \\ k_n(C_n \exp(ik_n l) - D_n \exp(-ik_n l)) &= \kappa E_n \exp(ikl). & & \end{aligned} \quad (11.24)$$

Используя эти условия, получаем

$$\begin{aligned} B_n &= A_n r_n = A_n \frac{(\kappa^2 - k_n^2)(\exp(i2k_n l) - 1)}{(\kappa - k_n)^2 \exp(i2k_n l) - (\kappa + k_n)^2}, \\ C_n &= -A_n \frac{2\kappa(\kappa + k_n)}{(\kappa - k_n)^2 \exp(i2k_n l) - (\kappa + k_n)^2}, \\ D_n &= A_n \frac{2\kappa(\kappa - k_n) \exp(i2k_n l)}{(\kappa - k_n)^2 \exp(i2k_n l) - (\kappa + k_n)^2}, \\ E_n &= A_n t_n = -A_n \frac{4\kappa k_n \exp[i(k_n - \kappa)l]}{(\kappa - k_n)^2 \exp(i2k_n l) - (\kappa + k_n)^2}. \end{aligned} \quad (11.25)$$

Полученные соотношения полностью определяют вид пространственных волновых функций (11.23).

11.3.2. Магнитное поле. В случае когда частица взаимодействует только с магнитным полем, собственные значения (11.21) имеют вид

$$\lambda_1 = \lambda_3 = B_0, \quad \lambda_2 = \lambda_4 = -B_0,$$

а отвечающие им ортогональные биспиноры определяются выражениями

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, \\ \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где $w^{(\sigma)}$ — спиноры, являющиеся собственными функциями уравнения $(\mathbf{nB}\boldsymbol{\sigma})w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}$. Волновая функция падающей частицы имеет в этом случае вид

$$\Psi_0(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} w^{(+)}(A_1 + A_3) \\ w^{(+)}(A_1 - A_3) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w^{(-)}(A_2 + A_4) \\ w^{(-)}(A_2 - A_4) \end{pmatrix} \right] \exp(ikz).$$

В частности, задавая коэффициенты A_n в виде $A_1 = A_3 = \alpha_+/\sqrt{2}$ и $A_2 = A_4 = \alpha_-/\sqrt{2}$, для волновой функции падающей частицы получаем

$$\Psi_0(z) = \sum_{\sigma=\pm 1} \alpha_{\sigma} \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ikz),$$

где коэффициенты α_{σ} определяют состояние магнитной поляризации падающей частицы и удовлетворяют условию

$$|\alpha_{+1}|^2 + |\alpha_{-1}|^2 = 1.$$

Волновые функции отраженной $\Psi_r(z)$ и прошедшей $\Psi_t(z)$ частиц имеют в этом случае вид

$$\begin{aligned} \Psi_r(z) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} w^{(+)}(A_1 + A_3)r_1 \\ w^{(+)}(A_1 - A_3)r_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w^{(-)}(A_2 + A_4)r_2 \\ w^{(-)}(A_2 - A_4)r_2 \end{pmatrix} \right] \exp(-ikz), \\ \Psi_t(z) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} w^{(+)}(A_1 + A_3)t_1 \\ w^{(+)}(A_1 - A_3)t_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w^{(-)}(A_2 + A_4)t_2 \\ w^{(-)}(A_2 - A_4)t_2 \end{pmatrix} \right] \exp(ikz), \end{aligned}$$

где $r_{1,2}$ и $t_{1,2}$ определяются выражениями (11.25).

Энергетические коэффициенты отражения R и прохождения T определяются выражениями

$$\begin{aligned} R &= \frac{A_1^* A_3 + A_3^* A_1}{A_1^* A_3 + A_3^* A_1 + A_2^* A_4 + A_4^* A_2} R_{+1} + \frac{A_2^* A_4 + A_4^* A_2}{A_1^* A_3 + A_3^* A_1 + A_2^* A_4 + A_4^* A_2} R_{-1}, \\ T &= \frac{A_1^* A_3 + A_3^* A_1}{A_1^* A_3 + A_3^* A_1 + A_2^* A_4 + A_4^* A_2} T_{+1} + \frac{A_2^* A_4 + A_4^* A_2}{A_1^* A_3 + A_3^* A_1 + A_2^* A_4 + A_4^* A_2} T_{-1}. \end{aligned}$$

Парциальные коэффициенты отражения $R_{\sigma=\pm 1}$ и прохождения $T_{\sigma=\pm 1}$ определяются выражениями

$$R_{\sigma} = \frac{(\kappa^2 - k_{\sigma}^2)^2 (1 - \cos(2k_{\sigma}l))}{(\kappa^2 - k_{\sigma}^2)^2 (1 - \cos(2k_{\sigma}l)) + 8\kappa^2 k_{\sigma}^2}, \quad (11.26)$$

$$T_{\sigma} = \frac{8\kappa^2 k_{\sigma}^2}{(\kappa^2 - k_{\sigma}^2)^2 (1 - \cos(2k_{\sigma}l)) + 8\kappa^2 k_{\sigma}^2}, \quad (11.27)$$

где

$$k_{\sigma} = \sqrt{\kappa^2 - a\sigma}$$

и

$$a = \frac{2m_0 |\mu_0| B_0}{\hbar^2}.$$

Формулы (11.26)–(11.27) относятся к случаю, когда $\text{Re}(k_{\sigma}) > 0$. Как видно из (11.3.2), при $\sigma = +1$ волновой вектор k_{+1} может быть чисто мнимым:

$$k_{+1} = i\sqrt{a - \kappa^2} = i\Gamma.$$

В этом случае формулы (11.26)–(11.27) принимают вид

$$R_{+1} = \frac{(\kappa^2 + \Gamma^2)^2 (\text{ch}(2\Gamma l) - 1)}{(\kappa^2 + \Gamma^2)^2 (\text{ch}(2\Gamma l) - 1) + 8\kappa^2 \Gamma^2},$$

$$T_{+1} = \frac{8\kappa^2 \Gamma^2}{(\kappa^2 + \Gamma^2)^2 (\text{ch}(2\Gamma l) - 1) + 8\kappa^2 \Gamma^2}.$$

Несложно видеть, что тождественно выполняется условие

$$R_{\sigma} + T_{\sigma} \equiv 1. \quad (11.28)$$

На основе полученных выше формул можно сделать следующие выводы:

1. Как следует из (11.3.2), дисперсионные свойства зависят лишь от состояния магнитной поляризации частицы σ и не зависят от четности состояния по отношению к оператору γ_5 . Поэтому пространственные части волновых функций $g_1(z)$ и $g_3(z)$ одинаковы: $g_1(z) = g_3(z) = g^{(+)}(z)$. Суперпозиция решений

$$\Psi_p^{(+)} = \frac{1}{2}(\psi_1 + \psi_3)g^{(+)}(z)$$

характеризуется положительной нормой $\overline{\Psi}_p^{(+)}\Psi_p^{(+)} = |g^{(+)}(z)|^2$ и значением спина

$$\overline{\Psi}_p^{(+)}\Sigma_z\Psi_p^{(+)} = \sigma,$$

т. е. соответствует положительному квартионному состоянию $\psi_{\sigma=+1}^{(+)}$ (см. формулу (8.85)), отвечающему частице. В свою очередь суперпозиция

$$\Psi_a^{(+)} = \frac{1}{2} (\psi_1 - \psi_3) g^{(+)}(z)$$

характеризуется отрицательной нормой $\overline{\Psi}_a^{(+)} \Psi_a^{(+)} = -|g^{(+)}(z)|^2$ и значением спина

$$\overline{\Psi}_a^{(+)} \Sigma_z \Psi_a^{(+)} = -\sigma,$$

т. е. соответствует отрицательному квартионному состоянию $\psi_{\sigma=+1}^{(-)}$, отвечающему античастице.

2. Оператор уравнения (7.2) для случая движения частицы в стационарном магнитном поле коммутирует с операторами $(\mathbf{n}_B \Sigma)$ и γ_4 . Амплитуды положительного и отрицательного квартионных состояний определяются выражениями $\frac{I \pm \gamma_4}{2} \Psi$ соответственно. Поскольку в указанном случае оператор γ_4 коммутирует с оператором уравнения (7.2), то процессов с изменением числа частиц при взаимодействии спинорного материального поля с магнитным полем не происходит: суммарное число положительных квартионов в рассеянном поле совпадает с числом положительных квартионов в падающей волне: $N_u^{(r)} + N_u^{(t)} = N_u^{(0)}$, сохраняется также и число отрицательных квартионов: $N_d^{(r)} + N_d^{(t)} = N_d^{(0)}$. В свою очередь, поскольку в рассматриваемом случае оператор $(\mathbf{n}_B \Sigma)$ коммутирует с оператором уравнения (7.2), сохраняется число частиц с определенным состоянием магнитной поляризации, что следует из равенства (11.28).

Однако указанные законы сохранения не определяют полностью состояния рассеянного поля, поскольку собственные значения указанных операторов определяют вид пространственных волновых функций, т. е. дисперсионные свойства волн материального поля. Дисперсионные свойства определяют характер эволюции состояния частицы, представленной в виде волнового пакета. Как следует из (11.22), уравнения для пространственных волновых функций зависят лишь от квантового числа σ . Следовательно, волновые пакеты, отвечающие двум состояниям магнитной поляризации, $\sigma = \pm 1$, будут распространяться в области ненулевого магнитного поля с различной групповой скоростью. Это вполне понятно, поскольку, как мы показали в гл. 10, масса покоя взаимодействующей с магнитным полем частицы, отвечающая различным состояниям поляризации, оказывается различной. Учитывая определение групповой скорости (4.17), из (11.3.2) получаем

$$v_g^{(\sigma)} = c \frac{\hbar k_0 c}{\sqrt{\hbar^2 k_0^2 c^2 + m_0^2 c^4 + a\sigma}}.$$

Следовательно, падающий волновой пакет пространственной ширины d , составленный из состояний с различными значениями магнитной

поляризации, при распространении в однородном магнитном поле будет распадаться на два пакета, отвечающие противоположным направлениям поляризации по отношению к вектору напряженности магнитного поля, через время t_0 , определяющееся выражением

$$(v_g^{(-)} - v_g^{(+)}) t_0 \geq d.$$

Таким образом, важным параметром, существенно влияющим на состояние рассеянных волновых пакетов (т.е. рассеянных частиц), является пространственная ширина области ненулевого значения поля l , определяющая время прохождения компонент волнового пакета, отвечающих двум ортогональным состояниям магнитной поляризации, через область ненулевого поля $t_0^{(\sigma)} = l/v_g^{(\sigma)}$.

3. Детерминант системы линейных уравнений (11.24) имеет вид

$$\Delta_n = (\kappa - k_n)^2 \exp(i2k_n l) - (\kappa + k_n)^2. \quad (11.29)$$

Обращение в нуль детерминанта означает, что система уравнений для коэффициентов B_n, C_n, D_n, E_n имеет нетривиальные решения при нулевом значении амплитуды падающей волны: $A_n = 0$. В рассматриваемом случае это условие имеет вид

$$\frac{\kappa - k_\sigma}{\kappa + k_\sigma} \exp(ik_\sigma l) = \pm 1. \quad (11.30)$$

Несложно видеть, что в случае частицы, взаимодействующей с магнитным полем, условие обращения в нуль детерминанта (11.29) выполняется, только если

$$\kappa = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c} = i \frac{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}}{\hbar c} = i\varepsilon$$

и

$$\operatorname{Re}(k_{-1}) > 0.$$

В этом случае уравнение (11.30) принимает вид

$$\sin(k_{-1} l) = \frac{2\varepsilon k_{-1}}{\varepsilon^2 + k_{-1}^2}.$$

Последнее условие определяет энергетический спектр связанных состояний нейтрона в однородном магнитном поле. Мы уже обсуждали это явление в разделе 10.2.4, поэтому не будем здесь останавливаться на этом вопросе.

11.3.3. Электрическое поле. В случае взаимодействия частицы со стационарным электрическим полем собственные значения имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \mp iE_0, \quad \lambda_{3,4} = \pm iE_0.$$

Поэтому дисперсионные свойства оказываются идентичными для безмассовых квартаионов, описываемых биспинорами ψ_1 и ψ_4 , и безмассовых квартаионов, описываемых биспинорами ψ_2 и ψ_3 , поскольку

$$k_1 = k_4 = \sqrt{\kappa^2 + ia}, \quad k_2 = k_3 = \sqrt{\kappa^2 - ia}, \quad (11.31)$$

где

$$a = \frac{2m_0 |\mu_0| E_0}{\hbar^2}. \quad (11.32)$$

Напомним, что при движении частицы в стационарном магнитном или электрическом поле ортогональные биспиноры (8.18) в каждой точке пространства имеют вид

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \psi_3 = \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix},$$

где спиноры $w^{(\sigma)}$ отвечают проекции спина на направление рассеивающего поля в данной точке пространства, равной $\sigma = \pm 1$ соответственно. Однако при этом биспиноры $\psi_{1,2}$ являются нечетными собственными функциями оператора γ_5 , а спиноры $\psi_{3,4}$ — четными.

Как мы отмечали выше, дисперсионные свойства волн материального поля, взаимодействующего с магнитным полем, зависят лишь от состояния магнитной поляризации. Как видно из (11.31), в случае взаимодействия частицы с электрическим полем дисперсионные свойства зависят как от состояния магнитной поляризации частицы, так и от четности по отношению к оператору γ_5 . Такие различия вполне объяснимы, поскольку между матрицами Σ и α имеет место связь: $\Sigma = \alpha\gamma_5$, поэтому спиновую часть гамильтониана уравнения (6.2) можно записать в виде

$$-\mu_0 (\Sigma \mathbf{B} - i\alpha \mathbf{E}) = -\mu_0 \Sigma (\mathbf{B} - i\gamma_5 \mathbf{E}).$$

Отсюда наглядно видно, что характер эволюции состояния частицы, взаимодействующей с электрическим полем, зависит в общем случае как от состояния магнитной поляризации частицы, так и от четности по отношению к оператору γ_5 .

Волновые функции отраженной Ψ_r и прошедшей Ψ_t частиц имеют в рассматриваемом случае вид

$$\begin{aligned} \Psi_r(z) &= \left[\begin{pmatrix} w^{(+)} (A_1 r_1 + A_3 r_2) \\ w^{(+)} (A_1 r_1 - A_3 r_2) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w^{(-)} (A_2 r_2 + A_4 r_1) \\ w^{(-)} (A_2 r_2 - A_4 r_1) \end{pmatrix} \right] \exp(-i\kappa z), \\ \Psi_t(z) &= \left[\begin{pmatrix} w^{(+)} (A_1 t_1 + A_3 t_2) \\ w^{(+)} (A_1 t_1 - A_3 t_2) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w^{(-)} (A_2 t_2 + A_4 t_1) \\ w^{(-)} (A_2 t_2 - A_4 t_1) \end{pmatrix} \right] \exp(i\kappa z), \end{aligned} \quad (11.33)$$

где коэффициенты r_n и t_n определяются выражениями (11.25):

$$\begin{aligned} r_n &= \frac{(\kappa^2 - k_n^2) (\exp(i2k_n l) - 1)}{(\kappa - k_n)^2 \exp(i2k_n l) - (\kappa + k_n)^2}, \\ t_n &= -\frac{4\kappa k_n \exp[i(k_n - \kappa)l]}{(\kappa - k_n)^2 \exp(i2k_n l) - (\kappa + k_n)^2}. \end{aligned}$$

В рассматриваемом случае энергетические коэффициенты отражения R_σ и прохождения T_σ имеют одинаковый вид для обоих состояний поляризации. Например, для случая $\sigma = +1$, учитывая, что $k_2^* = k_1$, получаем

$$R_{+1} = \frac{1}{A_3^* A_1 + A_1^* A_3} \left[\frac{A_3^* A_1 (\kappa^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_1 l)}{4\kappa^2 k_1^2 + (\kappa^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_1 l)} + \frac{A_1^* A_3 (\kappa^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)}{4\kappa^2 k_2^2 + (\kappa^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)} \right], \quad (11.34)$$

$$T_{+1} = \frac{1}{A_3^* A_1 + A_1^* A_3} \left[\frac{4A_3^* A_1 \kappa^2 k_1^2}{4\kappa^2 k_1^2 + (\kappa^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_1 l)} + \frac{4A_1^* A_3 \kappa^2 k_2^2}{4\kappa^2 k_2^2 + (\kappa^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)} \right].$$

В соответствии с (11.31) коэффициенты отражения для случая $\sigma = -1$ получаются подстановкой $A_1 \rightarrow A_4$ и $A_3 \rightarrow A_2$. Несложно видеть, что

$$R_\sigma + T_\sigma \equiv 1.$$

Коэффициент отражения больше нуля в области энергий налетающей частицы, определяемой условием $0 \leq \kappa \leq \kappa_{th}$, где

$$\kappa_{th} = \sqrt{a}.$$

Как мы отмечали выше, условие обращения в нуль детерминанта (11.29) означает, что система уравнений (11.24) имеет нетривиальные решения при $A_n = 0$. Учитывая соотношения (11.31), несложно видеть, что детерминант (11.29) принимает два различных значения, отвечающие случаям $k_1 = k_4$ и $k_2 = k_3$. Положим для определенности, что $\Delta_2 = 0$. Это нас приводит к следующему уравнению:

$$\frac{\kappa - k_2}{\kappa + k_2} \exp(ik_2 l) = 1. \quad (11.35)$$

Пространственные волновые функции $g_{2,3}$ принимают в этом случае вид

$$g_{2,3}(z) = \begin{cases} -\exp(-i\kappa z), & z < 0, \\ \sin(k_2(z - l/2)) / \sin(k_2 l/2), & 0 \leq z \leq l, \\ \exp(i\kappa(z - l)), & z > l. \end{cases}$$

Как видно, амплитуда отраженной волны равна минус единице, $B_2 = -1$, а амплитуда прошедшей волны $E_2 = 1$. Пусть падающая волна

имеет вид

$$\Psi_0^{(+)}(z) = A_1 \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix} \exp(i\kappa z), \quad (11.36)$$

тогда, учитывая (11.33), получаем

$$\bar{\Psi}_r^{(+)} \Psi_r^{(+)} = -A_1 r_1 - A_1^* r_1^*, \quad \bar{\Psi}_t^{(+)} \Psi_t^{(+)} = A_1 t_1 + A_1^* t_1^*.$$

При выполнении условия (11.35) коэффициенты r_1 и t_1 связаны соотношением

$$r_1 = t_1,$$

откуда получаем

$$\frac{E}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}(z) \Psi(z) dV = 0. \quad (11.37)$$

В рассматриваемом случае

$$r_1 + r_1^* = -\frac{a^2}{4\kappa_0^2 + a^2},$$

поэтому при $A_1 = 1$ отраженная волна соответствует состоянию частицы, а прошедшая — античастицы. Отметим, что κ_0 в последней формуле представляет собой одно из решений уравнения (11.35).

Условие $\Delta_2 = 0$ выполняется также и при знаке минус в правой части равенства (11.35). В этом случае $B_2 = 1$ и $E_2 = 1$, поэтому

$$\bar{\Psi}_r^{(+)} \Psi_r^{(+)} = A_1 r_1 + A_1^* r_1^*, \quad \bar{\Psi}_t^{(+)} \Psi_t^{(+)} = A_1 t_1 + A_1^* t_1^*.$$

Однако соотношение между коэффициентами r_1 и t_1 теперь принимает вид

$$r_1 = -t_1,$$

поэтому снова выполняется условие (11.37).

Таким образом, при выполнении условий

$$\frac{\kappa - k_2}{\kappa + k_2} \exp(ik_2 l) = \pm 1 \quad (11.38)$$

падающая частица, находящаяся в состоянии (11.36), представляющем собой когерентную суперпозицию частицы и античастицы, распадается на отраженную частицу и прошедшую античастицу (или наоборот, в зависимости от знака $\text{Re}(A_1 r_1)$). Как следует из формул (11.34), при энергии налетающей частицы, близкой к резонансным условиям (11.38), коэффициенты R и T могут принимать отрицательные значения, оставаясь в сумме равными единице: $R + T = 1$. В этом случае, как мы видели выше, появление античастиц в отраженном поле приводит к тому, что амплитуда прошедшей волны становится больше единицы.

11.3.4. Суперпозиция электрического и магнитного полей.

В общем случае суперпозиции магнитного и электрического полей все четыре собственных значения λ_n различны:

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 - i\mathbf{E}_0)^2}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{(\mathbf{B}_0 + i\mathbf{E}_0)^2},$$

поэтому дисперсионные свойства частицы в этом случае различны для всех четырех состояний, отвечающих ортогональным биспинарам (8.18), и определяются дисперсионными соотношениями

$$k_n = \sqrt{\kappa^2 \pm \frac{2m_0 |\mu_0|}{\hbar^2} \sqrt{B_0^2 - E_0^2 \mp i2\mathbf{B}_0\mathbf{E}_0}}. \quad (11.39)$$

Несложно видеть, что имеют место следующие соотношения:

$$k_3^* = k_1, \quad k_4^* = k_2. \quad (11.40)$$

Энергетические коэффициенты отражения и преломления определяются формулами

$$R = \frac{A_1 A_3^* r_1 r_3^* + A_1^* A_3 r_1^* r_3 + A_2 A_4^* r_2 r_4^* + A_2^* A_4 r_2^* r_4}{A_1 A_3^* + A_1^* A_3 + A_2 A_4^* + A_2^* A_4}, \quad (11.41)$$

$$T = \frac{A_1 A_3^* t_1 t_3^* + A_1^* A_3 t_1^* t_3 + A_2 A_4^* t_2 t_4^* + A_2^* A_4 t_2^* t_4}{A_1 A_3^* + A_1^* A_3 + A_2 A_4^* + A_2^* A_4}. \quad (11.42)$$

Вводя обозначения

$$u_n = \frac{\kappa - k_n}{\kappa + k_n},$$

выражения для коэффициентов r_n и t_n можно записать в виде

$$r_n = \frac{u_n (\exp(i2k_n l) - 1)}{u_n^2 \exp(i2k_n l) - 1}, \quad t_n = -\frac{(1 - u_n^2) \exp(ik_n l)}{u_n^2 \exp(i2k_n l) - 1}. \quad (11.43)$$

Используя эти выражения, получаем

$$r_3^* r_1 = \frac{2u_1^2 (1 - \cos(2k_1 l))}{1 - 2u_1^2 \cos(2k_1 l) + u_1^4}, \quad t_3^* t_1 = \frac{(1 - u_1^2)^2}{1 - 2u_1^2 \cos(2k_1 l) + u_1^4},$$

откуда следует

$$r_3^* r_1 + t_3^* t_1 = 1.$$

Таким образом, энергетические коэффициенты отражения и преломления (11.41)–(11.42) удовлетворяют условию

$$R + T = 1.$$

Из (11.43) также легко получаем следующие два соотношения:

$$r_n - t_n = \frac{\exp(ik_n l) - u_n}{u_n \exp(ik_n l) - 1}, \quad r_n + t_n = \frac{\exp(ik_n l) + u_n}{u_n \exp(ik_n l) + 1}. \quad (11.44)$$

Условие обращения в нуль детерминанта (11.29) имеет вид

$$u_n \exp(ik_n l) = \pm 1.$$

Пусть, например,

$$u_3 \exp(ik_3 l) = \pm 1, \quad (11.45)$$

тогда из (11.44) с учетом (11.40) следует

$$r_1 = \pm t_1.$$

Таким образом, так же как и в электрическом поле, падающая волна, заданная в виде когерентной суперпозиции состояний частицы и античастицы:

$$\Psi_0^{(+)}(z) = A_1 \begin{pmatrix} w_1 \\ w_1 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z),$$

распадается на отраженную частицу и прошедшую античастицу. Однако в отличие от случая чисто электрического поля, когда условие (11.38) выполняется одновременно для обеих пар решений: (ψ_1, ψ_3) и (ψ_2, ψ_4) , в случае суперпозиции электрического и магнитного полей условие (11.45) выполняется лишь для первой пары решений. Падающая волна, соответствующая второй паре решений, (ψ_2, ψ_4) (напомним, что эта пара решений отвечает противоположному направлению поляризации, задаваемому действительной частью углов Θ и Φ (см. гл. 8)), имеет при выполнении условий (11.45) ненулевую норму:

$$\Psi_0^{(-)}(z) = A_2 \begin{pmatrix} w_2 \\ w_2 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z) + A_4 \begin{pmatrix} w_4 \\ w_4 \end{pmatrix} \exp(i\kappa z).$$

В настоящем разделе мы полагали, что волновая функция частицы имеет вид

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 \psi_n g_n(z), \quad (11.46)$$

где ψ_n — ортогональные биспиноры (8.18), зависящие от направления и напряженности электрического и магнитного полей. Положим, например, что электрическое поле направлено вдоль оси z , а вектор напряженности магнитного поля лежит в плоскости (x, z) и составляет угол θ_0 с осью z , тогда спиноры (8.17) принимают вид

$$\begin{aligned} w_1 &= \begin{pmatrix} \cos \Theta/2 \\ \sin \Theta/2 \end{pmatrix}, & w_2 &= \begin{pmatrix} -\sin \Theta/2 \\ \cos \Theta/2 \end{pmatrix}, \\ w_3 &= \begin{pmatrix} \cos \Theta^*/2 \\ \sin \Theta^*/2 \end{pmatrix}, & w_4 &= \begin{pmatrix} -\sin \Theta^*/2 \\ \cos \Theta^*/2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где

$$\cos \Theta = \frac{B_0 \cos \theta_0 - iE_0}{\sqrt{B_0^2 - E_0^2 - i2B_0E_0 \cos \theta_0}}.$$

Однако в области нулевых значений напряженности полей в качестве ортогональных биспиноров мы можем выбрать биспиноры, отвечающие

состоянию поляризации по или навстречу произвольному направлению. Например, мы можем выбрать биспиноры следующего вида:

$$\begin{aligned}\psi_1^{(0)} &= \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ w^{(+)} \end{pmatrix}, & \psi_3^{(0)} &= \begin{pmatrix} w^{(+)} \\ -w^{(+)} \end{pmatrix}, \\ \psi_2^{(0)} &= \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ w^{(-)} \end{pmatrix}, & \psi_4^{(0)} &= \begin{pmatrix} w^{(-)} \\ -w^{(-)} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (11.47)$$

где спиноры $w^{(\sigma)}$ являются собственными функциями оператора σ_z с осью z , направленной в произвольном направлении. Тогда в области нулевой напряженности полей волновую функцию (11.46) можно представить в виде

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^4 \psi_n^{(0)} f_n(z). \quad (11.48)$$

Учитывая (11.47) и (11.48), несложно найти связь между функциями $f_n(z)$ и $g_n(z)$. Эта связь имеет вид

$$\begin{aligned}f_1 &= g_1 \cos \Theta/2 - g_2 \sin \Theta/2, & f_2 &= g_1 \sin \Theta/2 + g_2 \cos \Theta/2, \\ f_3 &= g_3 \cos \Theta^*/2 - g_4 \sin \Theta^*/2, & f_4 &= g_3 \sin \Theta^*/2 + g_4 \cos \Theta^*/2.\end{aligned}$$

Волновая функция налетающей частицы имеет в этом случае вид

$$\begin{aligned}\Psi_0(z) &= \begin{pmatrix} (A_1 \cos \Theta/2 - A_2 \sin \Theta/2 + A_3 \cos \Theta^*/2 - A_4 \sin \Theta^*/2) w^{(+)} \\ (A_1 \cos \Theta/2 - A_2 \sin \Theta/2 - A_3 \cos \Theta^*/2 + A_4 \sin \Theta^*/2) w^{(+)} \end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} (A_1 \sin \Theta/2 + A_2 \cos \Theta/2 + A_3 \sin \Theta^*/2 + A_4 \cos \Theta^*/2) w^{(-)} \\ (A_1 \sin \Theta/2 + A_2 \cos \Theta/2 - A_3 \sin \Theta^*/2 - A_4 \cos \Theta^*/2) w^{(-)} \end{pmatrix},\end{aligned}$$

где A_n — коэффициенты, входящие в выражение (11.23). Полагая, что коэффициенты A_n удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned}A_1 \cos \Theta/2 - A_2 \sin \Theta/2 &= A_3 \cos \Theta^*/2 - A_4 \sin \Theta^*/2, \\ A_1 \sin \Theta/2 + A_2 \cos \Theta/2 &= A_3 \sin \Theta^*/2 + A_4 \cos \Theta^*/2,\end{aligned}$$

для волновой функции падающей частицы получаем

$$\begin{aligned}\Psi_0(z) &= \begin{pmatrix} (A_1 \cos \Theta/2 - A_2 \sin \Theta/2) w^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} (A_1 \sin \Theta/2 + A_2 \cos \Theta/2) w^{(-)} \\ 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (11.49)$$

Таким образом, подбирая должным образом коэффициенты суперпозиции ортогональных решений (11.46), волновую функцию падающей частицы можно привести к виду (11.49), отвечающему суперпозиции положительных квартаонных состояний. Как видно, квартаоны (11.49) являются ортогональными, однако они с неизбежностью являются су-

перпозицией собственных состояний спинорного поля в области ненулевых значений напряженности электрического и магнитного полей. Выражение (11.49) наглядно демонстрирует возможность разложения волновой функции по базису общих квартионных состояний, о которых мы говорили ранее (см. разделы 8.6.6 и 10.4.5).

11.4. Отражение от полубесконечного барьера

Итак, проведенный анализ показывает, что резкие скачки напряженности внешнего поля не приводят к качественно новым явлениям в характере взаимодействия частицы с внешними электрическими и магнитными полями по сравнению с плавными изменениями напряженности внешних полей.

Удобство задач с резким изменением напряженности полей состоит в том, что отличия в дисперсионных свойствах различных собственных мод задачи $k_n(\omega)$ становятся более наглядными. Как мы отмечали ранее, именно различия в дисперсионных свойствах приводят к отличиям в характере взаимодействия частиц, задаваемых в виде волновых пакетов, с внешними электромагнитными полями. Выше мы рассматривали в основном случаи, когда область ненулевого внешнего поля имеет конечную протяженность. Это связано с тем, что при наличии электрического поля волновые векторы $k_n(\omega)$ становятся комплексными и, следовательно, волновая функция экспоненциально затухает в области ненулевого поля. Исключения составляют случай чисто магнитного поля и случай суперпозиции электрического и магнитного полей, когда $\mathbf{E}_0 \perp \mathbf{B}_0$ и при этом $B_0 > E_0$. В последних случаях, если энергия налетающей частицы выше порога отражения, то в области ненулевого поля все волновые векторы $k_n(\omega)$ являются реальными и прошедшая волна распространяется в области ненулевого поля не затухая. Например, в разделе 11.3.2 мы показали, что ввиду различия дисперсионных зависимостей, $k_{\sigma=+1}(\omega) \neq k_{\sigma=-1}(\omega)$, падающий волновой пакет разбивается в области ненулевого магнитного поля на два волновых пакета, распространяющихся с различной групповой скоростью.

Обсудим теперь специфику отражения частицы от полубесконечного скачка напряженности стационарного электрического поля. Поскольку, как мы видели выше, коэффициент отражения имеет одинаковое значение для обоих состояний поляризации, то рассмотрим случай, когда падающая волна имеет поляризацию $\sigma = +1$. Волновая функция частицы в этом случае имеет вид

$$\Psi(z) = \begin{cases} (A_1 \exp(ikz) + B_1 \exp(-ikz)) \psi_1 + \\ \quad + (A_3 \exp(ikz) + B_3 \exp(-ikz)) \psi_3, & z < 0, \\ C_1 \exp(ik_1 z) \psi_1 + C_3 \exp(-ik_3 z) \psi_3, & z > 0. \end{cases}$$

Напомним, что в соответствии с (11.31) $\text{Im}(k_1) > 0$ и $\text{Im}(k_3) < 0$, поэтому условию конечности волновой функции при $z \rightarrow \infty$ удовле-

творяют лишь оставленные нами экспоненциальные множители при коэффициентах C_n .

Используя условия непрерывности решения в точке $z = 0$, получаем

$$B_n = A_n r_n, \quad C_n = A_n t_n,$$

где

$$r_1 = \frac{\kappa - k_1}{\kappa + k_1}, \quad r_3 = \frac{\kappa + k_3}{\kappa - k_3}, \quad t_1 = \frac{2\kappa}{\kappa + k_1}, \quad t_3 = \frac{2\kappa}{\kappa - k_3}. \quad (11.50)$$

Энергетический коэффициент отражения определяется выражением

$$R = \frac{A_1^* A_3 r_1^* r_3 + A_3^* A_1 t_3^* r_1}{A_1^* A_3 + A_3^* A_1}.$$

Учитывая (11.50), получаем

$$r_1^* r_3 = r_3^* r_1 = 1.$$

Следовательно,

$$R \equiv 1,$$

т. е. нейтральная частица полностью выталкивается из области ненулевого электрического поля. Глубина, на которую частица проникает в область ненулевого электрического поля, определяется выражением $l_0 = (\text{Im}(k_1))^{-1}$. Глубина проникновения существенно зависит от энергии налетающей частицы и при $\kappa \gg \sqrt{a}$ равна $l_0 \approx 2\kappa/a$, где параметр a определяется выражением (11.32).

Обращаясь к теории волновых пакетов, изложенной в гл. 4, для пространственно временных волновых функций падающей, отраженной и прошедшей частиц в соответствии с формулами (4.12), (4.125) и (4.126) получаем

$$\begin{aligned} \Psi_0(z, t) &= \frac{(A_1 \psi_1 + A_3 \psi_3) \tau_0}{\sqrt{2\pi}} \int \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2} + i\kappa(\omega)(z + L) - i(\omega - \omega_0)t \right] d\omega, \\ \Psi_r(z, t) &= \frac{\tau_0}{\sqrt{2\pi}} \int (A_1 r_1(\omega) \psi_1 + A_3 r_3(\omega) \psi_3) \times \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2} + i\kappa(\omega)(L - z) - i(\omega - \omega_0)t \right] d\omega, \\ \Psi_t(z, t) &= \frac{A_1 \tau_0 \psi_1}{\sqrt{2\pi}} \int t_1(\omega) \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2} + i\kappa(\omega)L + ik_1(\omega)z - i(\omega - \omega_0)t \right] d\omega + \\ &\quad + \frac{A_3 \tau_0 \psi_3}{\sqrt{2\pi}} \int t_3(\omega) \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2 \tau_0^2}{2} + i\kappa(\omega)L - ik_3(\omega)z - i(\omega - \omega_0)t \right] d\omega, \end{aligned} \quad (11.51)$$

где мы опустили несущественный экспоненциальный множитель.

Волновая функция Ψ_0 описывает распространения в свободном пространстве падающего волнового пакета, который на расстоянии L от границы раздела имеет вид гауссовского импульса длительности τ_0 . Если длительность падающего импульса удовлетворяет условию $\tau_0 \gg \partial \varphi_{r,t}(\omega) / \partial \omega$, где $\varphi_{r,t}$ — фаза коэффициентов r_n и t_n , то можно

воспользоваться приближением $r(\omega) = r(\omega_0)$ и $t(\omega) = t(\omega_0)$. В этом случае профиль отраженного волнового пакета по-прежнему имеет гауссовский вид, длительность которого увеличивается в результате дифракционного расплывания (см. гл. 4).

Обратимся теперь к волновой функции Ψ_t . В соответствии с обсуждавшимися выше методами теории дисперсии разложим волновые векторы $\kappa(\omega)$ и $k_n(\omega)$ в ряд по степеням $(\omega - \omega_0)$. Разложение $\kappa(\omega)$ с точностью до членов второго порядка определяется выражениями (4.127)–(4.105). Разложение k_1 до членов второго порядка имеет вид

$$k_1(\omega) = k_1(\omega_0) + \frac{1}{v_1}(\omega - \omega_0) + \frac{\beta_1}{2}(\omega - \omega_0)^2,$$

где v_1 и β_1 являются теперь комплексными и могут быть представлены следующим образом:

$$v_1 = \left(\frac{\partial k_1}{\partial \omega}\right)^{-1} = c \frac{\sqrt{\omega_0^2 - \omega_C^2 + iac^2}}{\omega_0}, \quad \beta_1 = -\frac{1}{c} \frac{\omega_C^2 - iac^2}{(\omega_0^2 - \omega_C^2 + iac^2)^{3/2}}$$

и $\omega_C = m_0 c^2 / \hbar$. С учетом того что $k_3^* = k_1$, выражение для k_3 можно не выписывать.

Таким образом, параметр v_1 , имеющий смысл групповой скорости распространения волнового пакета в свободном пространстве, в области ненулевого электрического поля становится комплексным. Это связано с тем, что волновая функция экспоненциально затухает по мере удаления от границы раздела в область ненулевого электрического поля. Тем не менее, используя разложение (11.4), для волновой функции прошедшей частицы получаем

$$\begin{aligned} \Psi_t(z, t) = & \frac{A_1 t_1(\omega_0) \psi_1}{\sqrt{1 + i(\beta_0 L + \beta_1 z) \tau_0^{-2}}} \exp[i(\kappa(\omega_0) L + k_1(\omega_0) z)] \times \\ & \times \exp\left[-\frac{1}{2}\left(t - \frac{L}{v_0} - \frac{z}{v_1}\right)^2 \frac{1}{\tau_0^2 + i(\beta_0 L + \beta_1 z)}\right] + \\ & + \frac{A_3 t_3(\omega_0) \psi_3}{\sqrt{1 + i(\beta_0 L - \beta_1^* z) \tau_0^{-2}}} \exp[i(\kappa(\omega_0) L - k_1^*(\omega_0) z)] \times \\ & \times \exp\left[-\frac{1}{2}\left(t - \frac{L}{v_0} + \frac{z}{v_1^*}\right)^2 \frac{1}{\tau_0^2 + i(\beta_0 L - \beta_1^* z)}\right]. \quad (11.52) \end{aligned}$$

Полученная формула дает наглядную интерпретацию процесса отражения нейтральной частицы от области ненулевого электрического поля. Первое слагаемое в (11.52) описывает преломленную волну, направление распространения которой подчиняется классическим законам оптики. Действительно, максимум амплитуды указанной компоненты прошедшего волнового пакета в точке z достигается в момент времени $t_0 \approx L/v_0 + z/\text{Re}(v_1)$, т. е. равный сумме времен пролета расстояния L

в нулевом поле и расстояния z в области ненулевого поля. С другой стороны, второе слагаемое в (11.52) описывает частицу, которая индуцируется в области ненулевого поля падающей частицей и совершает зеркальное по отношению к ней движение. Действительно, максимум амплитуды этой компоненты прошедшей волны достигается в момент времени $t_m \approx L/v_0 - z/\text{Re}(v_1)$, следовательно, при $\text{Re}(v_1) \approx v_0$ эта компонента соответствует частице, совершающей зеркальное по отношению к падающей частице движение. Следует, однако, отметить, что $\bar{\psi}_n \psi_n = 0$, поэтому эти две компоненты волновой функции прошедшей волны имеют, каждая по отдельности, нулевую норму, т.е. возбуждения материального поля в области ненулевого электрического поля описываются волновыми функциями, являющимися собственными функциями оператора γ_5 .

Ненулевую норму имеет полная волновая функция (11.52). Величина $\bar{\Psi}_t \Psi_t$ пропорциональна произведению двух гауссовских функций, входящих в выражение (11.52), поэтому в области, занятой полем, возбуждение материального поля, имеющее вид частицы с ненулевой массой, существует лишь в те моменты времени и в тех областях пространства, где произведение указанных двух гауссовских функций не равно нулю.

Проведенный анализ показывает, что появление зеркальных состояний частиц однозначно связано с наличием областей с отрицательной дисперсией: $\partial k/\partial \omega < 0$. Для скалярных частиц, не имеющих внутренних степеней свободы, возникновение областей с отрицательной дисперсией может быть связано только с трансляционным движением. Если скачок потенциала электрического поля удовлетворяет условию $\Delta U = e\Delta\varphi > 2m_0c^2$, то точка возбуждения лежит на нижней ветви энергетической поверхности (см. рис. 5.2). Частицы с полужелым спином обладают как трансляционными, так и внутренними степенями свободы. Зеркальные состояния, связанные с трансляционными степенями свободы, также возникают в областях, где потенциальная энергия вдвое превышает массу покоя частицы. Зеркальные состояния, связанные с внутренними степенями свободы, возникают в областях ненулевого электрического поля и обусловлены тем, что возбуждения материального поля, описываемые четными и нечетными волновыми функциями оператора γ_5 (при заданном состоянии поляризации), соответствуют волнам, распространяющимся в противоположных направлениях вдоль вектора напряженности электрического поля.

Таким образом, зеркальные состояния частиц, обусловленные трансляционными степенями свободы, эквивалентны возбуждениям состояний с отрицательной энергией (или массой), в то время как зеркальные состояния, обусловленные внутренними степенями свободы, связаны с дисперсионными свойствами безмассовых возбуждений, являющихся собственными состояниями оператора γ_5 .

Глава 12

ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНО- И АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

Анализ задач взаимодействия спинорных частиц с внешними электромагнитными полями, проведенный в предыдущих главах, показал, что наличие внутренних степеней свободы спинорных частиц приводит к появлению качественно новых явлений. Причину возникающих отличий можно пояснить следующим образом. В гл. 5 мы видели, что спектры собственных значений скалярной частицы в притягивающем кулоновском поле и зарядово-сопряженной частицы в отталкивающем кулоновском поле являются зеркально симметричными относительно плоскости $E = 0$. При этом положительно частотный спектр состояний зарядово-сопряженной частицы в отталкивающем поле преобразуется в отрицательно частотный спектр состояний частицы в притягивающем поле. Вместе с тем, поскольку норма собственных волновых функций указанных двух задач является противоположной для всех значений квантовых чисел, энергетические спектры оказываются совпадающими.

Как мы увидим в настоящей главе, спектр собственных значений спинорной частицы в кулоновском поле качественно совпадает со спектром скалярной частицы. Однако в случае спинорной частицы один и тот же спектр собственных значений отвечает как состояниям частицы, так и состояниям античастицы, поэтому зеркально симметричными относительно плоскости $E = 0$ становятся энергетические спектры состояний частицы и античастицы. Как мы отмечали в гл. 7, уравнение, комплексно сопряженное с (7.2), не совпадает с уравнением для зарядово-сопряженной частицы, в результате требования инвариантности относительно CPT -преобразований приводят к необходимости введения новых состояний материального поля — киральных частиц. Это, впрочем, следует и из результатов общего рассмотрения, приведенного в гл. 8, где было показано, что общее решение уравнения (7.2) содержит четыре ортогональных биспинора (квартиона). В настоящей главе мы обсудим общие и отличительные черты состояний частиц, античастиц, киральных частиц и киральных античастиц.

В первой части главы мы проведем анализ задачи о движении частицы в постоянном магнитном поле и покажем отличие спектра собственных значений указанной задачи от нерелятивистских спектров и спектра, следующего из решения уравнения Дирака.

12.1. Спин в криволинейных координатах

12.1.1. Полный угловой момент. Продолжим анализ задач о взаимодействии частицы со стационарными внешними полями, $A_\mu(x) = A_\mu(\mathbf{r})$. В предыдущих главах мы провели анализ ряда одномерных задач рассеяния частицы во внешних полях, перейдем теперь к рассмотрению объемных задач. При взаимодействии частицы со стационарными внешними полями волновая функция представима в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar) \quad (12.1)$$

и уравнение (6.2) принимает вид

$$H(E)\Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (12.2)$$

где

$$H(E) = \frac{1}{2m_0} \left[\left(-i\hbar\nabla - \frac{q_0}{c}\mathbf{A} \right)^2 + m_0^2 c^2 - \frac{1}{c^2} (E - U(\mathbf{r}))^2 \right] - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B} - i\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}) \quad (12.3)$$

и мы ввели обозначение

$$U(\mathbf{r}) = q_0\varphi(\mathbf{r}).$$

Учитывая (3.60) и (3.67), для преобразования биспинорной волновой функции при операции трехмерных вращений получаем

$$\Psi'(\mathbf{r}') = \left(I + i\delta\boldsymbol{\theta} \left(\mathbf{1} + \frac{\boldsymbol{\Sigma}}{2} \right) \right) \Psi(\mathbf{r}).$$

Таким образом, сохраняющейся величиной для свободной частицы является оператор полного углового момента $\hbar\mathbf{j}$, определяющийся следующим равенством:

$$\hbar\mathbf{j} = \hbar\mathbf{l} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}. \quad (12.4)$$

Как мы отмечали ранее, операторы, отвечающие сохраняющимся величинам, коммутируют с оператором уравнения (7.2). Следовательно, если полный угловой момент является сохраняющейся величиной, то оператор \mathbf{j} должен коммутировать с оператором (12.3). При анализе коммутационных свойств оператора \mathbf{j} удобно перейти к криволинейным координатам, отражающим симметрию внешнего поля. При движении частицы во внешних полях, обладающих цилиндрической симметрией, удобно использовать компоненты оператора \mathbf{j} в цилиндрической системе координат. Из общих соображений ясно, что при взаимодействии частицы со стационарными магнитными полями сохраняющейся величиной может быть лишь проекция полного углового момента на направление магнитного поля, поскольку вектор \mathbf{B} является аксиальным вектором.

Однако прежде чем переходить к рассмотрению конкретных случаев, найдем общее выражение для коммутаторов операторов $\boldsymbol{\Sigma}$ и $\boldsymbol{\alpha}$

и спиновой части оператора (12.3). Эти коммутаторы имеют следующий вид:

$$[\mathbf{\Sigma}, H(E)] = i2\mu_0 ([\mathbf{\Sigma}\mathbf{B}] - i[\mathbf{\alpha}\mathbf{E}]), \quad (12.5)$$

$$[\mathbf{\alpha}, H(E)] = i2\mu_0 ([\mathbf{\alpha}\mathbf{B}] - i[\mathbf{\Sigma}\mathbf{E}]). \quad (12.6)$$

12.1.2. Внешние поля с цилиндрической симметрией. Рассмотрим движение частицы в аксиально симметричном стационарном внешнем поле с потенциалами: $\varphi = \varphi(\rho, z)$ и $\mathbf{A} = \mathbf{e}_\varphi A(\rho, z)$. В этом случае

$$\mathbf{E} = -\mathbf{e}_\rho \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} - \mathbf{e}_z \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad \mathbf{B} = -\mathbf{e}_\rho \frac{\partial A}{\partial z} + \mathbf{e}_z \frac{1}{\rho} \frac{\partial(\rho A)}{\partial \rho}. \quad (12.7)$$

Оператор (12.3) имеет в этом случае вид

$$H^{(c)} = \frac{1}{2m_0 c^2} \left[-\hbar^2 c^2 \Delta + 2i\hbar c q_0 \frac{A(\rho, z)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + m_0^2 c^4 - (E_n - U(\rho, z))^2 + q_0^2 A^2(\rho, z) \right] + \mu_0 (i\mathbf{\alpha}\mathbf{E} - \mathbf{\Sigma}\mathbf{B}). \quad (12.8)$$

Векторные спиновые операторы, входящие в (12.8), удобно связать с проекциями матрицы $\boldsymbol{\sigma}$ в цилиндрической системе координат, которые имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_\rho &= \sigma_+ \exp(-i\varphi) + \sigma_- \exp(i\varphi), \\ \sigma_\varphi &= -i\sigma_+ \exp(-i\varphi) + i\sigma_- \exp(i\varphi), \\ \sigma_z &= \sigma_z. \end{aligned} \quad (12.9)$$

Коммутационные соотношения для матриц $\sigma_\rho, \sigma_\varphi, \sigma_z$ имеют вид

$$[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2ie_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma, \quad (12.10)$$

где теперь $\alpha, \beta, \gamma = \rho, \varphi, z$ и $e_{\rho\varphi z} = 1$.

Оператор орбитального момента в цилиндрических координатах принимает вид

$$\mathbf{l} = \mathbf{e}_\rho \left(i \frac{z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \mathbf{e}_\varphi \left[-i \left(z \frac{\partial}{\partial \rho} - \rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] + \mathbf{e}_z \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (12.11)$$

Несложно видеть, что оператор проекции импульса на ось симметрии задачи, $l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$, коммутирует с оператором в квадратных скобках выражения (12.8), которое по своим симметричным свойствам совпадает с симметричными свойствами оператора уравнения КГФ. При вычислении коммутатора оператора l_z и последнего слагаемого в (12.8) удобно воспользоваться формулами (12.9), из которых следует, что

$$\frac{\partial \sigma_\rho}{\partial \varphi} = \sigma_\varphi, \quad \frac{\partial \sigma_\varphi}{\partial \varphi} = -\sigma_\rho.$$

Используя последнее выражение, получаем

$$[l_z, H^{(c)}] = -\mu_0 ([\mathbf{\alpha}\mathbf{E}] + i[\mathbf{\Sigma}\mathbf{B}])_z. \quad (12.12)$$

Таким образом, взаимодействие орбитального момента частицы и ее спина приводит к тому, что оператор проекции орбитального момента частицы на ось аксиальной симметрии задачи перестает быть интегралом движения, как это имеет место в скалярном случае.

Правила коммутации проекции спина Σ_z определяются общей формулой (12.5):

$$[\Sigma_z, H] = 2\mu_0 ([\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}] + i[\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B}])_z. \quad (12.13)$$

Из (12.12) и (12.13) следует, что проекция полного углового момента на ось симметрии внешнего поля является сохраняющейся величиной:

$$[j_z, H^{(c)}] = 0.$$

Таким образом, во внешнем поле с цилиндрической симметрией проекции углового момента и спина на ось симметрии поля не являются каждая в отдельности сохраняющимися величинами. Сохраняющейся величиной является проекция полного углового момента. Следует отметить, что формула (12.13) приводит к следующему полезному выводу. Из этой формулы следует, что проекция спина на направление магнитного поля сохраняется как в случае однородного внешнего магнитного поля $\mathbf{B} = \mathbf{e}_z B$, так и в случае, когда внешнее поле является суперпозицией параллельных магнитного и электрического полей: $\mathbf{B} = \mathbf{e}_z B$, $\mathbf{E} = \mathbf{e}_z E$.

В поле цилиндрической симметрии вида $\varphi(\rho, |z|)$ и $A(\rho, |z|)$ сохраняющейся величиной является четность. Действительно, оператор в квадратных скобках (12.8) коммутирует с оператором четности. Последнее слагаемое в (12.8) также коммутирует с оператором четности, поскольку в этом случае $\mathbf{E}(-\mathbf{r}) = -\mathbf{E}(\mathbf{r})$ и $\gamma_4 \boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\alpha} \gamma_4$, а также $\mathbf{B}(-\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r})$ и $\gamma_4 \boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma} \gamma_4$.

12.1.3. Движение в центрально-симметричном поле. Как мы уже отмечали выше, при анализе задач о движении частицы во внешних полях, обладающих сферической или цилиндрической симметрией, оказывается удобным перейти от декартовой системы координат к соответствующим криволинейным системам координат. Связь компонент матрицы $\boldsymbol{\sigma}$ в криволинейной системе координат с компонентами декартовой системы координат определяется общими правилами векторного анализа. Для сферической системы координат получаем

$$\begin{aligned} \sigma_r &= \sigma_+ \sin \theta \exp(-i\varphi) + \sigma_- \sin \theta \exp(i\varphi) + \sigma_z \cos \theta, \\ \sigma_\theta &= \sigma_+ \cos \theta \exp(-i\varphi) + \sigma_- \cos \theta \exp(i\varphi) - \sigma_z \sin \theta, \\ \sigma_\varphi &= -i\sigma_+ \exp(-i\varphi) + i\sigma_- \exp(i\varphi), \end{aligned} \quad (12.14)$$

где $\sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$. Коммутационные соотношения для матриц σ_\pm и σ_z имеют вид

$$[\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z, \quad [\sigma_\pm, \sigma_z] = \mp 2\sigma_\pm.$$

Используя эти коммутационные соотношения, для коммутаторов матриц (12.14) получаем

$$[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2ie_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma,$$

где $\alpha, \beta, \gamma = r, \theta, \varphi$ и $e_{r\theta\varphi} = 1$.

Оператор орбитального момента движения частицы в сферических координатах имеет вид

$$\mathbf{l} = -i[\mathbf{r}\nabla] = e_\theta \frac{i}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} - e_\varphi i \frac{\partial}{\partial\theta}. \quad (12.15)$$

Из (12.15) получаем также следующее выражение:

$$\mathbf{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = - \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right].$$

Оператор \mathbf{l}^2 совпадает с угловой частью оператора Лапласа:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \mathbf{l}^2.$$

При движении частицы в сферически симметричном стационарном поле ($\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(r)$ и $\mathbf{A} = \mathbf{0}$) оператор (12.3) принимает вид

$$H^{(s)}(E_n) = \frac{1}{2m_0c^2} \left[-\hbar^2c^2\Delta + m_0^2c^4 - (E_n - U(r))^2 \right] + i\mu_0\alpha_r E_r(r). \quad (12.16)$$

Несложно видеть, что оператор углового момента коммутирует с первым слагаемым в (12.16), поскольку \mathbf{l} коммутирует с оператором Лапласа и, как видно из (12.15), коммутирует также и с $U(r)$. При вычислении коммутатора оператора \mathbf{l} и последнего слагаемого в (12.16) удобно воспользоваться выражениями (12.14), из которых следует

$$\frac{\partial\sigma_r}{\partial\varphi} = \sigma_\varphi \sin\theta, \quad \frac{\partial\sigma_r}{\partial\theta} = \sigma_\theta.$$

Используя эти выражения, получаем

$$\begin{aligned} [l_\theta, \alpha_r E_r(r)] &= iE_r \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial\alpha_r}{\partial\varphi} = iE_r \alpha_\varphi = i[\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}]_\theta, \\ [l_\varphi, \alpha_r E_r(r)] &= -iE_r \frac{\partial\alpha_r}{\partial\theta} = -iE_r \alpha_\theta = i[\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}]_\varphi. \end{aligned}$$

Окончательно для коммутатора \mathbf{l} и $H^{(s)}$ получаем

$$[\mathbf{l}, H^{(s)}] = -\mu_0 [\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}]. \quad (12.17)$$

Таким образом, в отличие от теории скалярных полей, где в центрально-симметричном поле оператор орбитального движения частицы является интегралом движения, в случае спинорных полей орбитальный угловой момент частицы перестает быть сохраняющейся величиной.

Учитывая коммутационные соотношения (12.5), мы видим, что в сферически симметричном внешнем поле ($\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(r)$ и $\mathbf{A} = \mathbf{0}$) сохраняющейся величиной является оператор полного углового момента:

$$[\mathbf{j}, H^{(s)}] = [\mathbf{l}, H^{(s)}] + \frac{1}{2} [\boldsymbol{\Sigma}, H^{(s)}] = -\mu_0 [\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}] + \frac{1}{2} 2\mu_0 [\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}] = 0. \quad (12.18)$$

Поскольку радиальная проекция углового момента $l_r = (\mathbf{e}_r \mathbf{l})$ по определению равна нулю, то сохранение полного углового момента влечет за собой сохранение радиальной проекции спина:

$$[\Sigma_r, H^{(s)}] = 0. \quad (12.19)$$

Таким образом, при движении в центрально-симметричном поле сохраняющейся величиной является полный угловой момент. Орбитальный угловой момент и спин по отдельности не являются сохраняющимися величинами, сохраняющейся величиной является лишь радиальная проекция спина.

При движении в центрально-симметричном поле сохраняющейся величиной является четность. Действительно, несложно видеть, что

$$\hat{P}\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E} = \gamma_4 P_3 \boldsymbol{\alpha}\mathbf{E} = -\gamma_4 \boldsymbol{\alpha}\mathbf{E} P_3 = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{E} \gamma_4 P_3 = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{E} \hat{P}.$$

12.2. Атом геония

Наиболее точные значения магнитного момента электрона были получены в экспериментах с одиночными электронами, находящимися в ловушке Пеннинга в условиях сверхвысокого вакуума и при температуре 4 К [51, 52]. Ловушка образуется однородным магнитным полем и слабым электрическим квадрупольным полем. Охлаждение электрона в результате поглощения им радиочастотного излучения с частотой, несколько меньшей частоты его переходов, позволяет удерживать электрон в ловушке на протяжении десяти месяцев. Такое большое время жизни электрона в ловушке, обусловленное тем, что сила взаимодействия электрона с полями ловушки существенно превышает силу взаимодействия с окружением, позволило Демельту ввести специальный термин «атом геония». Движение электрона в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, является финитным, а следовательно, энергия поперечного движения электрона становится квантованной. Электрическое квадрупольное поле, соосное с магнитным, делает финитным и движение электрона вдоль направления магнитного поля. Геометрия ловушки выбирается такой, что позволяет достаточно точно рассчитать энергетические уровни электрона, по крайней мере вблизи минимума его потенциальной энергии. Расстояние между энергетическими уровнями продольного движения при этом значительно меньше расстояния между уровнями поперечного движения.

Поскольку потенциал ловушки является аксиально симметричным, проекции углового момента l_z и спина $s_z = \sigma_z/2$ являются сохраня-

ющимися величинами. Если магнитный момент электрона совпадает с магнетонном Бора, то энергетические уровни электрона в ловушке будут зависеть лишь от суммы $m + \sigma$, где m — собственное значение проекции углового момента орбитального движения электрона, а $\sigma = \pm 1$ — собственные значения оператора σ_z . Следовательно, энергии уровней, характеризуемых квантовыми числами ($m = m_1$, $\sigma = +1$) и ($m = m_2$, $\sigma = -1$), будут совпадать при $m_1 + 1 = m_2 - 1$. В случае если величина магнитного момента электрона отличается от μ_B , энергии уровней электрона с квантовыми числами (m_1 , $\sigma = +1$) и ($m_2 = m_1 + 2$, $\sigma = -1$) будут отличаться на величину

$$\Delta E = 2(|\mu| - \mu_B) B_0.$$

Измерение величины указанного сдвига позволяет определить величину магнитного момента электрона.

Измеренная в работах [53] величина магнитного момента электрона μ_e и позитрона μ_p составила

$$\begin{aligned} |\mu_e| / \mu_B &= 1,0011596521884(43), \\ |\mu_p| / \mu_B &= 1,0011596521879(43). \end{aligned}$$

В работе [54] на основе усреднения результатов 14 измерений для величины магнитного момента электрона было предложено следующее значение:

$$|\mu_e| / \mu_B = 1,0011596521855(40).$$

В предположении что электрон и позитрон должны удовлетворять *CPT*-инвариантности, в [55] было предложено единое взвешенное значение для магнитного момента электрона и позитрона

$$|\mu_{e,p}| / \mu_B = 1,0011596521883(42).$$

Атом геония может быть образован и помещением в ловушку протона. Сравнение частоты циклотронного резонанса протона и электрона дает возможность прецизионного измерения отношения масс протона M_p и электрона m_e . В работе [55] для указанного отношения приводятся следующие значения:

$$M_p / m_e = 1836,1526670(39).$$

Путем помещения в ловушку полностью ионизованного атома углерода было получено отношение масс иона углерода $^{12}\text{C}^{6+}$ и массы электрона [56]:

$$6m_e / M(^{12}\text{C}^{6+}) = 0,00027436518589(58).$$

12.2.1. Движение электрона в однородном магнитном поле.

Рассмотрим задачу о движении электрона в однородном магнитном поле $\mathbf{B} = \mathbf{e}_z B_0$. В этом случае векторный потенциал определяется

выражением $\mathbf{A} = \mathbf{e}_\varphi B_0 \rho / 2$ и уравнение (12.2) принимает следующий вид:

$$\left[\Delta + \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} + \frac{i |q_0| B_0}{\hbar c} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \left(\frac{q_0 B_0}{2 \hbar c} \right)^2 \rho^2 \right] \Psi(\mathbf{r}) = \frac{2m_0 |\mu_0| B_0}{\hbar^2} \Sigma_z \Psi(\mathbf{r}), \quad (12.20)$$

где мы учли, что магнитный момент электрона отрицателен. Как мы уже отмечали выше, при движении частицы в однородном магнитном поле проекция j_z оператора полного углового момента

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \frac{1}{2} \Sigma$$

является сохраняющейся величиной. Однако оператор уравнения (12.20) коммутирует также по отдельности с оператором проекции орбитального момента

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (12.21)$$

и с оператором проекции спина

$$s_z = \frac{1}{2} \Sigma_z.$$

Собственные функции оператора (12.21), удовлетворяющие уравнению

$$l_z \psi_m = m \psi_m,$$

имеют вид

$$\psi_m = \exp(im\varphi).$$

Собственные значения и собственные функции оператора, стоящего в правой части уравнения (12.20), были определены нами ранее в гл. 8. Напомним, что собственные значения являются вырожденными и равны

$$\lambda_{1,2} = \pm B_0, \quad \lambda_{3,4} = \pm B_0.$$

Как мы уже неоднократно отмечали, при взаимодействии частицы с магнитным полем уравнения для пространственных волновых функций положительных и отрицательных квартионов являются независимыми, поэтому без потери общности мы можем ограничиться анализом решений следующего вида:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma=\pm 1} A_\sigma \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} \\ 0 \end{pmatrix} g_{m\sigma}(\rho) \exp(im\varphi + ik_z z), \quad (12.22)$$

где спиноры $w^{(\sigma)}$ являются собственными функциями оператора σ_z :

$$\sigma_z w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}.$$

Отметим, что решения для отрицательных квартионов получаются действием оператора γ_5 на волновую функцию (12.22).

Для радиальных волновых функций $g_{m\sigma}(\rho)$ из (12.20) получаем следующие уравнения:

$$\frac{d^2 g_{m\sigma}}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dg_{m\sigma}}{d\rho} + \left(\beta_{m\sigma} - \frac{m^2}{\rho^2} - \left(\frac{q_0 B_0}{2\hbar c} \right)^2 \rho^2 \right) g_{m\sigma} = 0, \quad (12.23)$$

где

$$\beta_{m\sigma} = \left(\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} - k_z^2 - \frac{|q_0| B_0}{\hbar c} \left(m + \frac{\mu_0}{\mu_B} \sigma \right) \right).$$

Общее решение уравнения (12.23) имеет вид

$$g_{m\sigma}(\rho) = C_1 (\nu \rho^2)^{m/2} \exp(-\nu \rho^2/2) F\left(\frac{1+m}{2} - \frac{\beta_{m\sigma}}{4\nu}, 1+m, \nu \rho^2\right) + C_2 (\nu \rho^2)^{-m/2} \exp(-\nu \rho^2/2) F\left(\frac{1-m}{2} - \frac{\beta_{m\sigma}}{4\nu}, 1-m, \nu \rho^2\right), \quad (12.24)$$

где

$$\nu = \frac{|q_0| B_0}{2\hbar c} = \frac{m_0 \omega_H}{2\hbar}$$

и

$$\omega_H = \frac{|q_0| B_0}{m_0 c}. \quad (12.25)$$

Первое слагаемое в (12.24) переходит во второе при замене $m \rightarrow -m$, поэтому исследуем решение

$$g_{m\sigma}(\rho) = C (\nu \rho^2)^{m/2} \exp(-\nu \rho^2/2) F\left(\frac{1+m}{2} - \frac{\beta_{m\sigma}}{4\nu}, 1+m, \nu \rho^2\right).$$

Функция $F(p, q, z)$ становится конечным полиномом и, следовательно, удовлетворяет условиям при $\rho \rightarrow \infty$ в случае, когда выполняется условие

$$\frac{1+m}{2} - \frac{\beta_{m\sigma}}{4\nu} = -n, \quad (12.26)$$

где n — целое неотрицательное число. Нормированные волновые функции имеют в этом случае вид

$$G_{nm\sigma}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\nu}{\pi L} \frac{n!}{(n+m)!}} (\nu \rho^2)^{m/2} \times \exp(-\nu \rho^2/2) L_n^{(m)}(\nu \rho^2) \exp(im\varphi + ik_z z) w^{(\sigma)}, \quad (12.27)$$

где L — длина области, доступной для движения электрона в направлении напряженности приложенного магнитного поля, $L_n^{(m)}(z)$ — обобщенные полиномы Лагерра. Решение (12.27) не расходится в нуле при выполнении условия $m \geq -n$. Как видно, при выполнении условия (12.26) два линейно независимых решения в (12.24) совпадают, поскольку $L_{n+m}^{(-m)}(z) = (-z)^m \frac{n!}{(n+m)!} L_n^{(m)}(z)$.

12.2.2. Энергетический спектр. Условие (12.26) приводит к следующему спектру собственных значений энергии электрона:

$$E_{nm\sigma}^2 = m_0^2 c^4 + \hbar^2 c^2 k_z^2 + 2m_0 c^2 \left[\hbar \omega_H \left(n + m + \frac{1}{2} \right) + \mu_0 B_0 \sigma \right]. \quad (12.28)$$

Поскольку решение (12.27) удовлетворяет граничным условиям при $\rho = 0$ и $\rho \rightarrow \infty$ при выполнении условия $-n \leq m$, то, учитывая отмеченную выше симметрию линейно независимых решений в (12.24), мы должны положить в (12.28), что $-n \leq m \leq n$.

Отметим, что при $\mu_0 = \mu_B$ формула (12.28) принимает вид

$$E_{nm\sigma}^2 = m_0^2 c^4 + c^2 \hbar^2 k_z^2 + 2m_0 c^2 \hbar \omega_H \left(n + m + \frac{1 + \sigma}{2} \right).$$

Вводя собственное значение проекции оператора полного углового момента \mathbf{j} ,

$$j_z \Psi_M = M \Psi_M = \left(m + \frac{\sigma}{2} \right) \Psi_M,$$

последнее выражение для положительных значений m можно переписать в виде

$$E_{nM} = \sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2 c^2 k_z^2 + 2m_0 c^2 \hbar \omega_H (n + M + 1/2)}. \quad (12.29)$$

Таким образом, мы видим, что в случае $\mu_0 = \mu_B$ спектр энергетических уровней электрона в магнитном поле становится вырожденным относительно суммы $(n + M)$ квантовых чисел n и M , что является характерной чертой спектров, получаемых на основе решения уравнений Паули, КГФ и Дирака. В случае когда напряженность приложенного магнитного поля удовлетворяет условию $\hbar \omega_H \ll m_0 c^2$, мы получаем

$$\Delta E_{nM} = E_{nM} - m_0 c^2 \approx \hbar \omega_H \left(n + M + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0}.$$

Из (12.29) следует, что уровни с наименьшей возможной при данном значении углового момента j проекцией углового момента $M = -n - 1/2$ имеют нулевую энергию $\Delta E_{n, -n-1/2} = 0$ при $kz = 0$.

В отличие от (12.29), уравнение (12.20) при $\mu_0 \neq \mu_B$ приводит к сверхтонкому расщеплению уровней электрона в магнитном поле:

$$\Delta E_{nM\sigma} = \hbar \omega_H (n + M + 1/2) + (\mu_0 - \mu_B) B_0 \sigma. \quad (12.30)$$

Энергетический уровень с фиксированными значениями квантовых чисел n и M расщепляется на два подуровня с энергетическим расстоянием между ними $2(\mu_0 - \mu_B) B_0$. Именно такое расщепление уровней наблюдалось экспериментально в цикле работ Демельта с сотрудниками, проводивших прецизионное измерение спектров геония, т. е. электрона, находящегося в ловушке Пеннинга [51].

В предыдущих главах, рассматривая одномерные задачи рассеяния, мы уже отмечали, что каждая из зон (положительно и отрицательно частотных решений) свободной частицы в магнитном поле расщепляется на две подзоны, отвечающие собственным состояниям спинорного поля, отличающимся по знаку проекции магнитного момента на направление магнитного поля в данной точке пространства. Таким образом, ширина запрещенной зоны оказывается различной для двух состояний поляризации частицы и зависит от напряженности магнитного поля. Поскольку ширина запрещенной зоны определяет массу покоя частицы и равна ее удвоенной величине, $\Delta E_{gap} = 2mc^2$, то это означает, что масса покоя частицы, находящейся в магнитном поле, отличается от массы покоя свободной частицы и зависит от величины напряженности магнитного поля. Как видно из вышеприведенных формул, это явление фундаментально и присуще не только нейтральным, но и заряженным частицам. Действительно, сечение гиперплоскости состояний частицы с полуцелым спином, определяющее зависимость энергии частицы от квантовых чисел, характеризующих ее состояние, имеет вид

$$E_{nm\sigma}^{(\pm)}(p_z) = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + 2m_0 c^2 \left[\hbar \omega_H \left(n + m + \frac{1}{2} \right) + \mu_0 B_0 \sigma \right] + c^2 p_z^2}.$$

Следовательно, масса покоя частицы с полуцелым спином, находящейся в состоянии, определяемом квантовыми числами (n, m, σ) , при ее движении в однородном магнитном поле определяется выражением

$$m_{nm\sigma} c^2 = \sqrt{m_0^2 c^4 + 2m_0 c^2 \left[\hbar \omega_H \left(n + m + \frac{1}{2} \right) + \mu_0 B_0 \sigma \right]}.$$

Ввиду квантованности движения частицы в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, масса покоя, определяющая ее инерционные характеристики по отношению к движению вдоль направления магнитного поля, оказывается разной для различных состояний поперечного движения и, так же как для нейтральной частицы, зависит от состояния ее магнитной поляризации.

12.2.3. Напряженность индуцированного магнитного поля.

Находясь в состоянии с квантовыми числами (n, m, σ) , электрон совершает орбитальное движение, а потому имеет ненулевое значение плотности тока. Подставляя (12.27) в выражение для плотности тока (7.15), после неложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{nm\sigma} = & -e_\varphi 4c\mu_0 \frac{\nu^{3/2}}{\pi L} \frac{n!}{(n+M-1/2)!} \times \\ & \times \exp(-\nu\rho^2) (\nu\rho^2)^M L_n^{(M+1/2)}(\nu\rho^2) L_n^{(M-1/2)}(\nu\rho^2) + \\ & + e_\varphi 2c(\mu_0 - \mu_B) f_{nm\sigma}^2(\rho) \left(\nu\rho + \frac{m}{\rho} \right) - e_z \frac{|q|\hbar k_z}{m_0} f_{nm\sigma}^2(\rho), \end{aligned} \quad (12.31)$$

где $L_n^{(m)}(z)$ — полиномы Лагерра. В случае когда движение электрона в направлении оси z ограничено потенциальными стенками, последнее слагаемое в (12.31) пропадает. Из приведенного выражения следует, что в состоянии с наибольшей отрицательной проекцией полного углового момента, $M = -n - 1/2$ и $k_z = 0$, плотность тока пропорциональна $\mu_0 - \mu_B$, а не обращается в нуль, как это следует из решений уравнения КГФ или уравнения Дирака.

Напряженность магнитного поля, создаваемого плотностью тока (12.31), определяется уравнением Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (12.32)$$

Подставляя в (12.32) выражение (12.31), получаем

$$\mathbf{B} = -\mathbf{e}_z B_0 \frac{1}{m_0 c^2} \frac{q^2}{L} \left[\sigma \frac{\mu_0}{\mu_B} \frac{n!}{(n+m)!} (L_n^{(m)}(\nu\rho^2))^2 (\nu\rho^2)^m \exp(-\nu\rho^2) + \right. \\ \left. + 2 \frac{n!}{(n+m)!} \int_{\sqrt{\nu}\rho}^{\infty} (L_n^{(m)}(x^2))^2 x^{2m} \exp(-x^2) \left(x + \frac{m}{x}\right) dx \right]. \quad (12.33)$$

Формула (12.33) допускает достаточно простую интерпретацию. Действительно, хорошо известно, что емкость цилиндрического конденсатора пропорциональна его длине. Учитывая это обстоятельство, несложно догадаться, что величина

$$W_E(\rho) = \frac{q^2 I_{nM}(\rho)}{L}$$

определяет плотность энергии электростатического поля, создаваемого электроном, находящимся в состоянии с квантовыми числами (n, M) . Таким образом, мы видим, что величина напряженности магнитного поля, индуцируемого движением электрона во внешнем магнитном поле B_0 , определяется отношением энергии электростатического поля, создаваемого электроном в данном квантовом состоянии, к его энергии покоя $m_0 c^2$. Дальнейшая интерпретация двух слагаемых в (12.33), одно из которых пропорционально магнитному моменту электрона μ_0 , а другое — магнетону Бора μ_B , будет дана ниже.

Вид слагаемых в квадратной скобке выражения (12.33) показан на рис. 12.1. Из рисунка видно, что индуцированное поле для всех состояний электрона, кроме состояний с наименьшей энергией, противоположно внешнему полю. И только в состояниях с наименьшей энергией при заданном квантовом числе n индуцированное поле совпадает по направлению с индуцирующим полем. Действительно, для состояний с $m = -n$ выражение (12.33) принимает вид

$$\mathbf{B} = -\mathbf{e}_z B_0 \frac{1}{m_0 c^2} \frac{q^2}{L} \left(\frac{\mu_0}{\mu_B} \sigma + 1 \right) \frac{1}{n!} (\nu\rho^2)^n \exp(-\nu\rho^2);$$

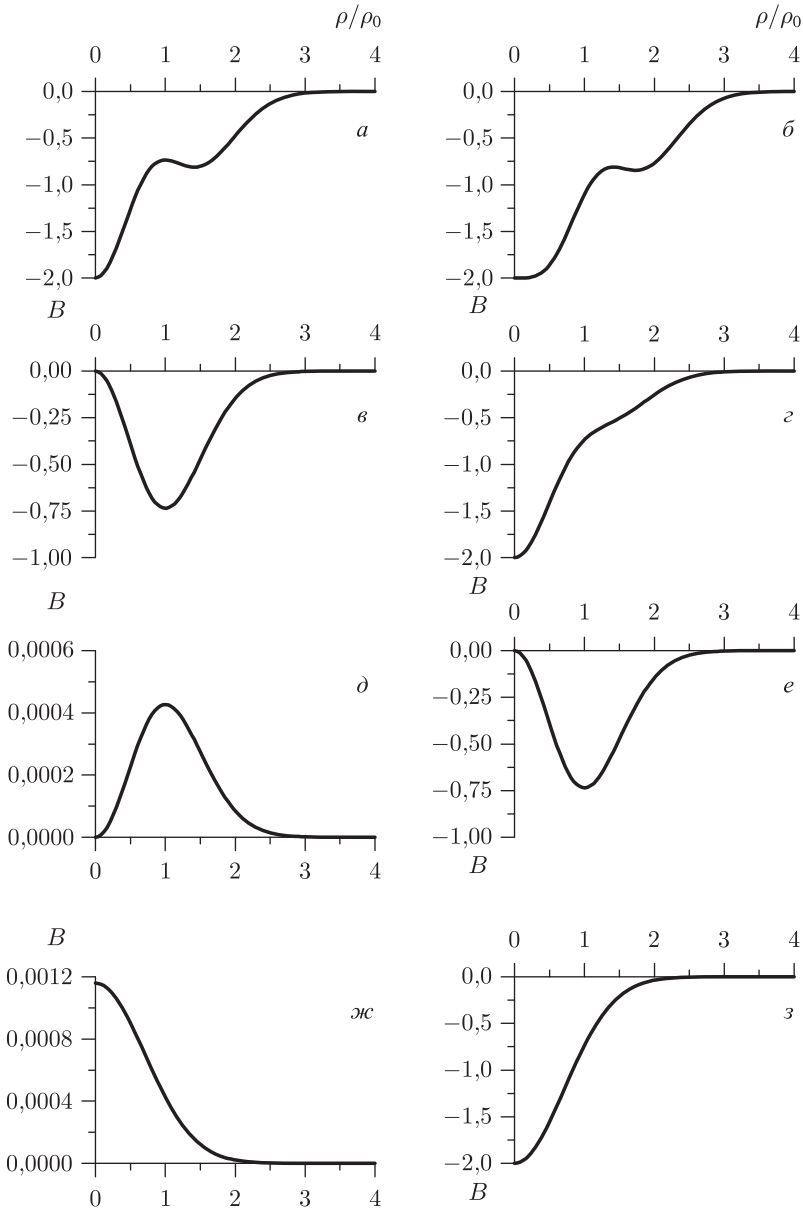


Рис. 12.1. Пространственный профиль индуцированного магнитного поля для состояний частицы, определяемых квантовыми числами: $n = 1, m = 1, \sigma = -1$ (а); $n = 1, m = 1, \sigma = 1$ (б); $n = 1, m = 0, \sigma = -1$ (в); $n = 1, m = 0, \sigma = 1$ (г); $n = 1, m = -1, \sigma = -1$ (д); $n = 1, m = -1, \sigma = 1$ (е); $n = 0, m = 0, \sigma = -1$ (ж); $n = 0, m = 0, \sigma = 1$ (з)

поскольку $\mu_0 > \mu_B$, то при $\sigma = -1$ правая часть этого выражения становится положительной. Таким образом, отклик системы свободных электронов, находящихся во внешнем магнитном поле, может быть как диамагнитным, так и парамагнитным. Это обстоятельство иллюстрирует одно из качественных отличий уравнения (7.2) от уравнения КГФ и уравнения Дирака, поскольку в рамках указанных теорий отклик свободных электронов всегда является диамагнитным.

12.2.4. Учет электрического поля ловушки. Рассматривая выше задачу об атоме геония, мы пренебрегли наличием электрического поля ловушки. Однако, как мы видели в предыдущих главах, характер движения частицы в магнитном поле и в суперпозиции электрического и магнитного полей оказывается существенно различным. Конечность пространственного объема, доступного для движения частицы в ловушке Пеннинга, непосредственно связана с наличием квадрупольного конденсатора, ограничивающего движение частицы вдоль направления вектора напряженности магнитного поля. Электростатический потенциал ловушки Пеннинга описывается следующей формулой:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_0 \frac{z^2 - \rho^2/2}{d^2},$$

где z — координата в направлении приложенного магнитного поля. С учетом электростатического поля квадрупольного конденсатора уравнение (12.2)–(12.3) принимает вид

$$\begin{aligned} \left[\Delta + \kappa^2 + i \frac{|e|B_0}{\hbar c} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \left(\frac{eB_0}{2\hbar c} \right)^2 \rho^2 - \frac{2EU(\rho, z)}{\hbar^2 c^2} + \frac{U^2(\rho, z)}{\hbar^2 c^2} \right] \Psi = \\ = \frac{\mu_0}{\mu_B} \left(\frac{|e|B_0}{\hbar c} \Sigma_z + i \frac{U_0}{\hbar c d^2} (2z\alpha_z - \rho\alpha_\rho) \right) \Psi, \end{aligned} \quad (12.34)$$

где $U_0 = e\varphi_0 > 0$, μ_0 — величина магнитного момента электрона.

При учете поперечной проекции электрического поля E_ρ проекция спина на направление магнитного поля перестает быть сохраняющейся величиной. Ненулевая компонента E_ρ приводит к так называемому магнетронному движению, в результате которого орбита электрона становится циклоидой. Однако поскольку напряженность электрического поля ловушки существенно меньше напряженности магнитного поля, то в нулевом приближении этой компонентой электрического поля можно пренебречь. В этом случае оператор Σ_z коммутирует с (12.34), поэтому решение этого уравнения можно искать в следующем виде:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} f_\sigma(\rho, z) \\ w^{(\sigma)} g_\sigma(\rho, z) \end{pmatrix} \exp(im\varphi). \quad (12.35)$$

Учтем также, что $U_0 \ll m_0 c^2$, тогда уравнение (12.34) существенно упрощается. Подставляя (12.35) в (12.34), получаем

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} - \nu^2 \rho^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2EU_0}{\hbar^2 c^2} \frac{z^2}{d^2} + \kappa^2 - 2\nu \left(m + \frac{\mu_0}{\mu_B} \sigma \right) \right] f =$$

$$= i \frac{\mu_0}{\mu_B} \frac{2U_0}{\hbar c d^2} z \sigma g, \quad (12.36)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} - \nu^2 \rho^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2EU_0}{\hbar^2 c^2} \frac{z^2}{d^2} + \kappa^2 - 2\nu \left(m + \frac{\mu_0}{\mu_B} \sigma \right) \right] g =$$

$$= i \frac{\mu_0}{\mu_B} \frac{2U_0}{\hbar c d^2} z \sigma f, \quad (12.37)$$

где

$$\nu = \frac{|e|B_0}{2\hbar c}.$$

Общее решение системы уравнений (12.36)–(12.37) имеет вид

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}) = C_1 \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} (G_\sigma(\rho, z) + G_\sigma^*(\rho, z)) \\ w^{(\sigma)} (G_\sigma(\rho, z) - G_\sigma^*(\rho, z)) \end{pmatrix} +$$

$$+ C_2 \begin{pmatrix} w^{(\sigma)} (G_\sigma(\rho, z) - G_\sigma^*(\rho, z)) \\ w^{(\sigma)} (G_\sigma(\rho, z) + G_\sigma^*(\rho, z)) \end{pmatrix}, \quad (12.38)$$

где $C_{1,2}$ — константы нормировки. Функция $G_\sigma(\rho, z)$, удовлетворяющая требуемым граничным условиям, определяется следующим выражением:

$$G_\sigma(\rho, z) = (\nu \rho^2)^{m/2} \exp \left(-\frac{\nu \rho^2}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2EU_0 d^2}{\hbar^2 c^2}} \frac{z^2}{d^2} - i\sigma \frac{\mu_0}{\mu_B} \sqrt{\frac{U_0}{2E}} \frac{z}{d} \right),$$

$$L_{n_\rho}^{(m)}(\nu \rho^2) H_{n_z} \left(\left(\frac{2EU_0 d^2}{\hbar^2 c^2} \right)^{1/4} \frac{z}{d} + i\sigma \frac{\mu_0}{\mu_B} \left(\frac{\hbar^2 U_0}{8m_0^3 c^4 d^2} \right)^{1/4} \right),$$

где $L_n^{(m)}(z)$ — обобщенные полиномы Лагерра, $H_n(z)$ — полиномы Эрмита, n_ρ и n_z — целые неотрицательные числа. Энергетический спектр, зависящий от квантовых чисел n_ρ , m , σ , n_z , определяется решением следующего уравнения:

$$\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} = \frac{|e|B_0}{\hbar c} \left(m + \frac{\mu_0}{\mu_B} \sigma \right) + \frac{2|e|B_0}{\hbar c} \left(n_\rho + \frac{1+m}{2} \right) +$$

$$+ \frac{2\sqrt{2EU_0}}{\hbar c d} \left(n_z + \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{\mu_0}{\mu_B} \right)^2 \frac{U_0}{2Ed^2}. \quad (12.39)$$

Учитывая, что $E - m_0 c^2 \ll m_0 c^2$, решение этого уравнения можно записать в следующем виде:

$$E = \left[m_0^2 c^4 + 2m_0 c^2 \left(\hbar \omega_H \left(n_\rho + m + \frac{1}{2} \right) + \mu_0 B_0 \sigma + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \sqrt{\frac{2\hbar^2 U_0}{m_0 d^2}} \left(n_z + \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{\mu_0}{\mu_B} \right)^2 \frac{\hbar^2 U_0}{2m_0 d^2} \right]^{1/2}. \quad (12.40)$$

Мы видим, что последнее выражение отличается от полученного выше спектра атома геония лишь наличием последних двух слагаемых. Следует, однако, отметить, что решение (12.40) является приближенным. Отличия точного решения уравнения (12.39) от (12.40), по-видимому, необходимо учитывать при прецизионных измерениях величин материальных констант частиц с использованием ловушки Пеннинга.

В соответствии с результатами предыдущего анализа специфика взаимодействия частицы с электрическим полем состоит в том, что состояние частицы в электрическом поле характеризуется ненулевым электрическим моментом. Действительно, как видно из (12.38)–(12.2.4), состояние частицы становится суперпозицией положительных и отрицательных кварионов. Амплитуда положительного кварионного состояния в первом слагаемом в (12.38) определяется действительной частью функции $G_\sigma(\rho, z)$, а отрицательного квариона — мнимой частью этой функции. Из (12.2.4) следует, что мнимая часть функции $G_\sigma(\rho, z)$ мала при $U_0 \ll m_0 c^2$, поэтому амплитуда отрицательного квариона много меньше амплитуды положительного. Тем не менее ненулевое значение амплитуды отрицательного кварионного состояния приводит к ненулевому значению вектора электрической поляризации. Действительно, используя определение вектора электрической поляризации (7.21), получаем

$$\mathbf{P}_\sigma = -i\mu_0 \bar{\Psi}_\sigma \boldsymbol{\alpha} \Psi_\sigma = -i\mathbf{e}_z \mu_0 \sigma (\varphi_\sigma^+ \chi_\sigma - \varphi_\sigma \chi_\sigma^+).$$

Несложно видеть, что

$$|\mathbf{P}_\sigma| \sim \operatorname{Re}(G_\sigma) \operatorname{Im}(G_\sigma).$$

Одновременно меняется и величина вектора намагниченности:

$$\mathbf{M}_\sigma = \mu_0 \bar{\Psi}_\sigma \boldsymbol{\Sigma} \Psi_\sigma = \mathbf{e}_z \mu_0 \sigma (\varphi_\sigma^+ \varphi_\sigma - \chi_\sigma^+ \chi_\sigma),$$

откуда получаем

$$|\mathbf{M}_\sigma| \sim (\operatorname{Re}(G_\sigma))^2 - (\operatorname{Im}(G_\sigma))^2.$$

Таким образом, при учете ненулевого электрического поля ловушки величина магнитного момента электрона становится несколько меньше.

Указанные отличия величин векторов магнитной и электрической поляризации от их значений для электрона в магнитном поле являются причиной того, что энергетический спектр, определяемый формулой (12.39), отличается от спектра, рассчитанного в разделе 12.2.2.

12.3. Сферические волны

В гл. 4, проводя анализ состояний свободного спинорного поля, мы показали, что для однозначного задания состояния свободной частицы, наряду с заданием состояния по трансляционным степеням свободы

и знака частотности решения, необходимо задание состояния по внутренним степеням свободы движения частицы. Трансляционные степени свободы состояния, задаваемого в виде плоской волны, определяются собственными значениями оператора импульса \mathbf{p} и оператора $i\hbar \partial/\partial t$. Однако разложение по плоским волнам удобно лишь при исследовании одномерных задач рассеяния. При исследовании трехмерных задач рассеяния более удобным является разложение по сферическим волнам, поскольку потенциалы электромагнитного поля, создаваемого распределением зарядов, заключенных в пространственной области конечных размеров, стремятся к нулю при $r \rightarrow \infty$ и, следовательно, волновая функция частицы на бесконечности представляет собой в этом случае суперпозицию сходящихся и расходящихся сферических волн.

12.3.1. Свободная частица. Уравнение движения свободной частицы в стационарном случае имеет вид

$$(\Delta + k^2) \Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (12.41)$$

где

$$k^2 = \frac{E^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2}.$$

Как мы отмечали выше, при движении в центрально-симметричном поле орбитальный угловой момент и спин не являются по отдельности сохраняющимися величинами. Сохраняющейся величине отвечает полный угловой момент

$$\hbar \mathbf{j} = \hbar (\mathbf{l} + \mathbf{s}) = [\mathbf{r}\mathbf{p}] + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma}. \quad (12.42)$$

Собственными функциями оператора орбитального углового момента являются сферические функции $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$, а собственными функциями оператора спина $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ — трехмерные спиноры $w^{(\sigma)}$. Собственные функции оператора полного углового момента находятся по правилам сложения моментов:

$$\Omega_{jm} = (-1)^{l+m-1/2} \sqrt{2j+1} \sum_{\sigma} \begin{pmatrix} l & 1/2 & j \\ m-\sigma & \sigma & -m \end{pmatrix} Y_{l, m-\sigma} w^{(\sigma)}.$$

Поскольку для свободной частицы каждый из операторов \mathbf{j} и \mathbf{l} по отдельности отвечает сохраняющейся величине, то в качестве ортогональных состояний мы можем выбрать состояния, отвечающие двум возможным значениям, $j = l \pm 1/2$, при заданной величине l . Они

имеют вид

$$\begin{aligned}\Omega_{j=l+1/2, l, m} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m-1/2} \\ \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m+1/2} \end{pmatrix}, \\ \Omega_{j=l-1/2, l, m} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m-1/2} \\ \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m+1/2} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (12.43)$$

Спиноры (12.43) являются ортонормированными,

$$\int \Omega_{jlm}^+ \Omega_{j'l'm'} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

и обладают одинаковой пространственной четностью, определяемой выражением $(-1)^l$.

Однако поскольку при движении в центрально-симметричном поле сохраняющейся величине отвечает лишь оператор \mathbf{j} , то ясно, что компонентами биспинорной волновой функции будут спиноры (12.43), отвечающие одному и тому же значению j , которые имеют вид

$$\begin{aligned}\Omega_{j, l, m}^{(1)}(\theta, \varphi) &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2j}} Y_{l, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{j-m}{2j}} Y_{l, m+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \\ \Omega_{j, l+1, m}^{(2)}(\theta, \varphi) &= \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}} Y_{l+1, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} Y_{l+1, m+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (12.44)$$

Спиноры (12.44), так же как и спиноры (12.43), являются ортонормированными:

$$\int \Omega_{jlm}^+ \Omega_{j'l'm'} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Верхний индекс в (12.44) является, естественно, избыточным, поскольку одновременное выполнение равенств $j = j'$ и $l = l'$ невозможно. Однако мы пока оставим этот индекс ради удобства последующего изложения. Спиноры (12.44) связаны между собой следующими соотношениями:

$$\Omega_{j, l+1, m}^{(2)} = -i\sigma_r \Omega_{j, l, m}^{(1)}, \quad \Omega_{j, l, m}^{(1)} = i\sigma_r \Omega_{j, l+1, m}^{(2)}, \quad (12.45)$$

которые можно получить, используя, например, первое из соотношений (12.14).

Итак, мы видим, что общее положительно частотное решение уравнения (12.41) для свободной частицы, находящейся в состоянии, ха-

рактизуемом значением радиального квантового числа k , полным угловым моментом j и его проекцией m , можно записать в следующем виде:

$$\Psi_{kjm}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1,2} \left(A_{jm}^{(n)} - \gamma_5 B_{jm}^{(n)} \right) u_{jm}^{(n)} f_{kj}^{(n)}(r), \quad (12.46)$$

т. е. в виде разложения по четырем квартионным состояниям:

$$\begin{aligned} u_{jm}^{(1)} &= \begin{pmatrix} \Omega_{j,l,m}^{(1)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, & u_{jm}^{(2)} &= \begin{pmatrix} \Omega_{j,l+1,m}^{(2)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\ -\gamma_5 u_{jm}^{(1)} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \Omega_{j,l,m}^{(1)} \end{pmatrix}, & -\gamma_5 u_{jm}^{(2)} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \Omega_{j,l+1,m}^{(2)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12.47)$$

Линейно независимые решения (12.47) имеют следующую пространственную четность:

$$\begin{aligned} \hat{P}u_{jm}^{(1)} &= (-1)^l u_{jm}^{(1)}, & \hat{P}u_{jm}^{(2)} &= (-1)^{l+1} u_{jm}^{(2)}, \\ \hat{P}\gamma_5 u_{jm}^{(1)} &= (-1)^{l+1} \gamma_5 u_{jm}^{(1)}, & \hat{P}\gamma_5 u_{jm}^{(2)} &= (-1)^l \gamma_5 u_{jm}^{(2)}, \end{aligned}$$

где действие оператора релятивистской четности \hat{P} определяется соотношением (7.107), т. е. $\hat{P}u_{jm}(\theta, \varphi) = \gamma_4 u_{jm}(\pi - \theta, \varphi + \pi)$. Таким образом, во внешнем поле определенную четность будут иметь состояния, являющиеся суперпозициями состояний: $u_{jm}^{(1)} \pm \gamma_5 u_{jm}^{(2)}$ и $u_{jm}^{(2)} \pm \gamma_5 u_{jm}^{(1)}$.

Подставляя (12.46) в (12.41), для радиальных волновых функций $f^{(n)}$ получаем

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f^{(1)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df^{(1)}}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} f^{(1)} + k^2 f^{(1)} &= 0, \\ \frac{d^2 f^{(2)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df^{(2)}}{dr} - \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} f^{(2)} + k^2 f^{(2)} &= 0. \end{aligned} \quad (12.48)$$

Следовательно, общее решение (12.85) имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_{kjm}(\mathbf{r}) &= \left(A_l u_{jm}^{(1)} j_l(kr) + B_{l+1} u_{jm}^{(2)} j_{l+1}(kr) \right) + \\ &+ \gamma_5 \left(C_l u_{jm}^{(1)} j_l(kr) + D_{l+1} u_{jm}^{(2)} j_{l+1}(kr) \right), \end{aligned} \quad (12.49)$$

где $j_l(x)$ — сферические функции Бесселя,

$$j_l(x) = \sqrt{\pi/2x} J_{l+1/2}(x).$$

Как видно, решения для свободной частицы в виде сферических волн, отвечающие определенной четности и являющиеся суперпозицией состояний положительных и отрицательных квартионов, могут быть

представлены в виде

$$\Psi_{kjm}^{(l)} = \begin{pmatrix} A_l \Omega_{j,l,m}^{(1)}(kr) \\ -D_{l+1} \Omega_{j,l+1,m}^{(2)}(kr) \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{kjm}^{(l+1)} = \begin{pmatrix} B_{l+1} \Omega_{j,l+1,m}^{(2)}(kr) \\ -C_l \Omega_{j,l,m}^{(1)}(kr) \end{pmatrix},$$

где волновые функции $\Psi_{kjm}^{(l)}$ и $\Psi_{kjm}^{(l+1)}$ имеют четность $(-1)^l$ и $(-1)^{l+1}$ соответственно.

12.3.2. Разложение плоской волны по сферическим волнам.

Как мы видели в предыдущих главах, при анализе задач рассеяния состояние падающей частицы можно представить в виде волнового пакета, являющегося суперпозицией плоских волн. В трехмерных задачах рассеяния конечное состояние является суперпозицией сферических волн, поэтому значительный интерес в этом случае представляет вид разложения плоской волны по сферическим волнам. Итак, пусть падающая частица описывается плоской волной:

$$\Psi_{k\sigma}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} u_\sigma \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ikz), \quad (12.50)$$

где u_σ — собственные решения уравнения

$$\sigma_z u_\sigma = \sigma u_\sigma.$$

Спиноры u_σ имеют вид

$$u_{+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (12.51)$$

Поскольку при свободном движении уравнения для радиальных волновых функций положительных и отрицательных квантовых состояний являются независимыми, то ограничимся лишь случаем, когда падающая частица находится в положительном квантовом состоянии. В соответствии с приведенным выше анализом общий вид волновой функции положительного квантона определяется выражением

$$\Psi_{kjm}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} A_l \Omega_{j,l,m}^{(1)}(kr) + B_l \Omega_{j,l+1,m}^{(2)}(kr) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12.52)$$

Состояниям (12.50) соответствуют проекции полного углового момента $m = \pm 1/2$. В соответствии с вышеприведенными формулами

спиноры $\Omega_{jlm}^{(1,2)}$ имеют в этом случае вид

$$\Omega_{j,l,m=1/2}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} i^l \sqrt{l+1} P_l \\ -\frac{i^l}{\sqrt{l+1}} P_l^{(1)} \exp(i\varphi) \end{pmatrix}, \quad (12.53)$$

$$\Omega_{j,l+1,m=1/2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} -i^{l+1} \sqrt{l+1} P_{l+1} \\ -\frac{i^{l+1}}{\sqrt{l+1}} P_{l+1}^{(1)} \exp(i\varphi) \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{j,l,m=-1/2}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \frac{i^l}{\sqrt{l+1}} P_l^{(1)} \exp(-i\varphi) \\ i^l \sqrt{l+1} P_l \end{pmatrix}, \quad (12.54)$$

$$\Omega_{j,l+1,m=-1/2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} -\frac{i^{l+1}}{\sqrt{l+1}} P_{l+1}^{(1)} \exp(-i\varphi) \\ i^{l+1} \sqrt{l+1} P_{l+1} \end{pmatrix},$$

где $P_l^{(m)}(\cos\theta)$ — полиномы Лежандра.

Хорошо известным является разложение плоской волны по сферическим волнам:

$$\exp(ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos\theta) j_l(kr). \quad (12.55)$$

Подставляя (12.53) в (12.52) и суммируя по l , с учетом (12.55) получаем

$$u_{k,m=1/2}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ikz)$$

при значениях коэффициентов A_l и B_l в (12.91), равных

$$A_l = -B_l = \sqrt{4\pi(l+1)} \quad (12.56)$$

и

$$u_{j,m=-1/2}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp(ikz)$$

при

$$A_l = B_l = \sqrt{4\pi(l+1)}. \quad (12.57)$$

Таким образом, полагая в (12.52) коэффициенты A и B равными (12.56) и (12.57), мы получаем из (12.52) волновые функции, совпадающие с (12.50).

12.3.3. Сходящиеся и расходящиеся сферические волны. Согласно определению оператора орбитального момента \mathbf{l} его радиальная проекция равна нулю: $l_r = \mathbf{l} \mathbf{e}_r = 0$. Следовательно, радиальная проекция спина Σ_r является сохраняющейся величиной в центрально-симметричном поле. Используя соотношения (12.45), из спиноров $\Omega^{(1,2)}$

можно легко составить спиноры, являющиеся собственными функциями оператора σ_r . Действительно, из (12.45) получаем

$$\sigma_r \Omega_{j, m, \sigma = \pm 1} = (\pm 1) \Omega_{j, m, \sigma = \pm 1},$$

где

$$\Omega_{j, m, \sigma = \pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Omega_{j, l, m}^{(1)} \pm i \Omega_{j, l+1, m}^{(2)} \right). \quad (12.58)$$

Спиноры $\Omega_{jm\sigma}$ являются ортонормированными:

$$\int \Omega_{jm\sigma}^+ \Omega_{j'm'\sigma'} d\omega = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'}.$$

Подставляя (12.58) в (12.52), получаем

$$u_{kjm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Omega_{j, m, \sigma = +1} (A_l j_l(kr) - i B_l j_{l+1}(kr)) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Omega_{j, m, \sigma = -1} (A_l j_l(kr) + i B_l j_{l+1}(kr)).$$

В частности, используя (12.56) и (12.57), получаем следующие асимптотические выражения для волновых функций в случае $m = \pm 1/2$:

$$u_{k, m = \pm 1/2}(\mathbf{r}) = \sqrt{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \left[\sqrt{l+1} (\mp i)^{l+1} \Omega_{j, m = \pm 1/2, \sigma = +1} \frac{\exp(\pm ikr)}{kr} + \sqrt{l+1} (\pm i)^{l+1} \Omega_{j, m = \pm 1/2, \sigma = -1} \frac{\exp(\mp ikr)}{kr} \right]. \quad (12.59)$$

Таким образом, падающая волна, отвечающая положительной проекции углового момента на направление ее распространения, является суперпозицией расходящихся сферических волн с положительной радиальной проекцией спина и сходящихся волн с отрицательной радиальной проекцией спина. При $m = -1/2$ радиальные проекции спина сходящихся и расходящихся волн меняются на противоположные.

Используя рекуррентные соотношения для присоединенных полиномов Лежандра, спиноры $\Omega_{jm\sigma}$ можно преобразовать к следующему виду:

$$\begin{aligned} \Omega_{j, 1/2, +1} &= i^l \sqrt{\frac{l+1}{8\pi}} (P_l + P_{l+1}) \begin{pmatrix} 1 \\ \exp(i\varphi) \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ \Omega_{j, 1/2, -1} &= i^l \sqrt{\frac{l+1}{8\pi}} (P_l - P_{l+1}) \begin{pmatrix} 1 \\ -\exp(i\varphi) \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ \Omega_{j, -1/2, +1} &= i^l \sqrt{\frac{l+1}{8\pi}} (P_l - P_{l+1}) \begin{pmatrix} \exp(-i\varphi) \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \Omega_{j, -1/2, -1} &= i^l \sqrt{\frac{l+1}{8\pi}} (P_l + P_{l+1}) \begin{pmatrix} -\exp(-i\varphi) \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Таким образом, спиноры $\Omega_{jm\sigma}$ для случая $m = \pm 1/2$ являются произведениями полиномов Лежандра и спиноров $w^{(\sigma)}$, являющихся собственными функциями уравнения $\sigma_r w^{(\sigma)} = \sigma w^{(\sigma)}$:

$$w^{(\sigma=+1)} = \begin{pmatrix} \exp(-i\varphi/2) \cos \theta/2 \\ \exp(i\varphi/2) \sin \theta/2 \end{pmatrix}, \quad w^{(\sigma=-1)} = \begin{pmatrix} -\exp(-i\varphi/2) \sin \theta/2 \\ \exp(i\varphi/2) \cos \theta/2 \end{pmatrix}.$$

Используя эти выражения, формулу (12.59) можно преобразовать к виду

$$u_{k, m=1/2}(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty} = -\frac{i}{\sqrt{2}} \frac{\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta)}{\sqrt{1+\cos \theta}} w^{(+1)} \frac{\exp(ikr + i\varphi/2)}{kr} + \\ + \frac{i}{\sqrt{2}} \frac{\sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (2l+1) P_l(\cos \theta)}{\sqrt{1-\cos \theta}} w^{(-1)} \frac{\exp(-ikr + i\varphi/2)}{kr}. \quad (12.60)$$

При интерпретации формулы (12.60) удобно воспользоваться следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) &= \frac{1}{\sqrt{2(1-\cos \theta)}}, \\ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n P_n(\cos \theta) &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\cos \theta)}}, \\ \sum_{n=0}^{\infty} n P_n(\cos \theta) &= -\frac{1}{2\sqrt{2(1-\cos \theta)}}, \\ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n n P_n(\cos \theta) &= -\frac{1}{2\sqrt{2(1+\cos \theta)}}. \end{aligned} \quad (12.61)$$

Из (12.61), в частности, получаем

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) P_n(\cos \theta) &= 2\delta(1-\cos \theta), \\ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (2n+1) P_n(\cos \theta) &= 2\delta(1+\cos \theta). \end{aligned}$$

Таким образом, при $z \rightarrow -\infty$ (т. е. $\theta = \pi$) асимптотика решения (12.60) имеет вид

$$u_{k, m=1/2}|_{z \rightarrow -\infty} = - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\exp(-ikr)}{ikr} \delta(1+\cos \theta).$$

Учитывая равенства $\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta)|_{\theta=\pi} = \exp(-ikr)$, мы видим, что сходящаяся волна в (12.60) описывает падающую из $z = -\infty$

волну, угловой спектр которой имеет вид дельта-функции. При $z \rightarrow \infty$ асимптотическое решение (12.60) принимает вид

$$u_{k, m=1/2} \Big|_{z \rightarrow \infty} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\exp(ikr)}{ikr} \delta(1 - \cos \theta),$$

т. е. угловой спектр прошедшей волны ($z = +\infty$) совпадает с угловым спектром падающей волны. При наличии рассеяния угловой спектр прошедшей волны будет отличаться от углового спектра падающей. Таким образом, граничные условия при решении задачи рассеяния плоской падающей волны центрально-симметричным потенциалом должны выбираться из тех соображений, что асимптотика сходящейся волны должна иметь вид, определяемый (12.60).

12.3.4. Безмассовые сферические квартионы. Ортогональные биспиноры, отвечающие элементарным возбуждениям спинорного поля, взаимодействующего с электромагнитным полем, являются собственными функциями спиновой части уравнения (7.2). При взаимодействии спинорного поля со сферически симметричным стационарным электрическим полем спиновая часть уравнения (7.2) пропорциональна радиальной проекции оператора α , т. е. $\mathbf{n}_r \alpha = \alpha_r$. Учитывая вышеприведенные формулы, несложно видеть, что собственными функциями оператора α_r являются следующие:

$$\alpha_r \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ \Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ \Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix}, \quad \alpha_r \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ -\Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix} = -\sigma \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ -\Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix}. \quad (12.62)$$

Легко прослеживается аналогия между формулами (12.62) и (8.82); так же как и в случае однородного электрического поля, в качестве характеристики состояния частицы по внутренним степеням свободы выступает проекция оператора α на направление электрического поля. Указанная аналогия становится еще более прозрачной, если в дополнение к соотношениям (12.62) привести следующие:

$$\Sigma_r \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ \Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ \Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix}, \quad \Sigma_r \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ -\Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma} \\ -\Omega_{jm\sigma} \end{pmatrix}. \quad (12.63)$$

Несложно видеть, что соотношения (12.63) совпадают с соотношениями (8.81).

Таким образом, базис безмассовых сферических квартионных состояний составляют следующие биспиноры:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma=+1} \\ \Omega_{jm\sigma=+1} \end{pmatrix}, & \psi_2 &= \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma=-1} \\ \Omega_{jm\sigma=-1} \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma=+1} \\ -\Omega_{jm\sigma=+1} \end{pmatrix}, & \psi_4 &= \begin{pmatrix} \Omega_{jm\sigma=-1} \\ -\Omega_{jm\sigma=-1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12.64)$$

Очевидно, что безмассовые сферические квартионы обладают свойствами ортогональности, определяемыми общими соотношениями (8.19).

12.4. Движение электрона в кулоновском поле

Задача о движении электрона в кулоновском поле является базовой моделью водородоподобного атома, т.е. атома с одним электроном, в предположении что ядро атома имеет бесконечную массу. Успехи, достигнутые в последнее время в атомной спектроскопии, позволяют надежно регистрировать эффекты, связанные с конечностью массы и размеров ядра, с наличием у ядра атома ненулевого магнитного и электрического моментов и т.д. Тем не менее эта задача имеет основополагающее значение, поскольку позволяет аналитически рассчитать энергетический спектр, который является нулевым приближением решения двухчастичной задачи о спектре стационарных состояний двух противоположно заряженных частиц, имеющих произвольные массы.

В гл. 5 мы рассчитали спектр состояний релятивистской бесспиновой частицы в притягивающем кулоновском поле. Как было показано, наличие в уравнении КГФ слагаемого, пропорционального квадрату потенциала (см. (5.70)), приводит к образованию спектра связанных состояний как для частицы, так и для зеркальной частицы. Учитывая наличие аналогичного слагаемого и в уравнении (7.2), несложно догадаться, что и спектр состояний частицы с полуцелым спином в кулоновском поле будет содержать два базиса состояний, один из которых относится к положительно частотной зоне состояний, а другой — к отрицательно частотной. Как мы увидим, первое слагаемое разложения положительно частотного спектра связанных состояний в ряд по $Z\alpha \ll 1$ совпадает со спектром, рассчитываемым на основе решения нерелятивистского уравнения Шредингера, поэтому, так же как и в гл. 5, мы будем называть положительно частотный базис собственных состояний стандартным базисом состояний.

12.4.1. Общее решение. Рассмотрим задачу о движении заряженной частицы с полуцелым спином в притягивающем кулоновском поле. Потенциальная энергия имеет в этом случае вид

$$U(\mathbf{r}) = e\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (12.65)$$

Подставляя это выражение в уравнение (12.2), получаем

$$\left[\Delta - \frac{m_0^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} \right] \Psi = -i \frac{\mu_0}{\mu_B} \frac{Z\alpha}{r^2} \alpha_r \Psi, \quad (12.66)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры, $\alpha_r = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{n}_r = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix}$ и \mathbf{n}_r — радиальный единичный вектор сферической системы координат. Мы положили $q_0 = -|e|$ и учли, что магнитный момент электрона отрицателен, поэтому μ_0 в (12.66) есть модуль магнитного момента электрона.

В предыдущем разделе мы определили собственные функции спиновой части уравнения (12.66). Они имеют вид безмассовых квартио-

нов (12.64). Однако, как мы видели в предыдущих главах, состояние спинорного поля, взаимодействующего с электрическим полем, является суперпозицией безмассовых квартионных состояний. Учитывая, что сохраняющейся величиной в центрально-симметричном поле является полный угловой момент $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$, в качестве решений уравнения (12.66) удобно выбрать суперпозиции квартионных состояний (12.47), отвечающие определенному значению полного углового момента и определенной пространственной четности, которые имеют вид

$$\begin{aligned}\Psi_{j=l+1/2}(\mathbf{r}) &= \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} f_1(r) \\ \Omega_{j,l+1,m}^{(2)} g_1(r) \end{pmatrix}, \\ \Psi_{j=l-1/2}(\mathbf{r}) &= \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(2)} f_2(r) \\ \Omega_{j,l-1,m}^{(1)} g_2(r) \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{12.67}$$

где спиноры $\Omega_{jlm}^{(1,2)}$ определяются выражениями (12.44).

Подставляя (12.67) в (12.66) и учитывая соотношения (12.45), в случае $j = l + 1/2$ для радиальных волновых функций получаем

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2\alpha^2 - l(l+1)}{r^2} \right] f_1 = -\frac{Z_1\alpha}{r^2} g_1,\tag{12.68a}$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2\alpha^2 - (l+1)(l+2)}{r^2} \right] g_1 = \frac{Z_1\alpha}{r^2} f_1,\tag{12.68б}$$

где мы ввели следующие обозначения:

$$Z_1 = Z \frac{\mu_0}{\mu_B}, \quad \kappa^2 = \frac{m_0^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2}.$$

В случае $j = l - 1/2$ уравнения для радиальных волновых функций имеют вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2\alpha^2 - l(l+1)}{r^2} \right] f_2 = \frac{Z_1\alpha}{r^2} g_2,\tag{12.69a}$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2\alpha^2 - l(l-1)}{r^2} \right] g_2 = -\frac{Z_1\alpha}{r^2} f_2.\tag{12.69б}$$

При поиске решений систем уравнений (12.68а, б) и (12.69а, б) удобно воспользоваться решением следующего уравнения:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{df}{dx} - \left(a - \frac{b}{x} - \frac{\gamma}{x^2} \right) f(x) = 0,$$

которое имеет вид

$$\begin{aligned}f(x) &= C_1 \exp(-\sqrt{a}x) x^s \cdot F\left(-\frac{b}{2\sqrt{a}} + s + 1, 2(s+1), 2\sqrt{a}x\right) + \\ &+ C_2 \exp(-\sqrt{a}x) x^{-(s+1)} F\left(-\frac{b}{2\sqrt{a}} - s, -2s, 2\sqrt{a}x\right),\end{aligned}\tag{12.70}$$

где $F(p, q, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция и

$$s = \frac{\sqrt{1 - 4\gamma} - 1}{2}.$$

Действительно, коэффициенты a и b одинаковы для всех уравнений (12.68)–(12.69) и имеют вид

$$a = \kappa^2, \quad b = \frac{EZ\alpha}{\hbar c},$$

а коэффициент γ можно найти, приравнявая слагаемые, пропорциональные $1/r^2$, в обеих частях уравнений.

Обратимся сначала к системе уравнений (12.68а, б). Поскольку два решения (12.70) линейно независимы, то можно рассматривать их по отдельности, поэтому остановимся сначала на анализе решения при коэффициенте C_1 в (12.70). Учитывая вышесказанное, будем искать решение уравнений (12.68а, б) в виде

$$f_1(r) = f_0 G(\xi, s, r), \quad g_1(r) = g_0 G(\xi, s, r), \quad (12.71)$$

где

$$G(\xi, s, r) = \exp(-\kappa r) r^s F\left(-\frac{EZ\alpha}{\hbar c \kappa} + s + 1, 2(s + 1), 2\kappa r\right) \quad (12.72)$$

и

$$\xi = -\frac{EZ\alpha}{\hbar c \kappa} + s + 1.$$

Подставляя (12.71) в (12.68), для коэффициентов f_0 и g_0 получаем следующую систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} (Z^2 \alpha^2 - l(l + 1) - \gamma) f_0 + Z_1 \alpha g_0 &= 0, \\ Z_1 \alpha f_0 - (Z^2 \alpha^2 - (l + 1)(l + 2) - \gamma) g_0 &= 0. \end{aligned}$$

Условие существования нетривиальных решений полученной системы уравнений приводит к следующим двум значениям параметра s :

$$\gamma_{\pm} = Z^2 \alpha^2 - (j + 1/2)^2 \pm \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z_1 \alpha)^2}. \quad (12.73)$$

Соответствующие этим двум значениям коэффициенты $f_0^{(\pm)}$ и $g_0^{(\pm)}$ связаны соотношениями

$$g_0^{(+)} = -\zeta f_0^{(+)}, \quad f_0^{(-)} = -\zeta g_0^{(-)},$$

где

$$\zeta = \frac{Z_1 \alpha}{j + 1/2 + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z_1 \alpha)^2}}.$$

Таким образом, решение системы уравнений (12.68а, б) имеет вид

$$f_1^{(\pm)}(r) = f_0^{(\pm)} G(\xi, s_{\pm}, r), \quad g_1^{(\pm)}(r) = g_0^{(\pm)} G(\xi, s_{\pm}, r),$$

где

$$s_{\pm} = \left(\sqrt{1 - 4\gamma_{\pm}} - 1 \right) / 2. \quad (12.74)$$

12.4.2. Стандартный базис состояний. Асимптотическое выражение вырожденной гипергеометрической функции при $r \rightarrow \infty$ имеет вид

$$F(a, b, z)|_{z \rightarrow \infty} = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}(-z)^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \exp(z)z^{a-b}.$$

Следовательно, волновая функция (12.72) остается конечной при $r \rightarrow \infty$ в случае, когда $a = -n$, т.е. когда выполняется следующее условие:

$$-\frac{EZ\alpha}{\hbar c} + s_{\pm} + 1 = -n, \quad (12.75)$$

где n — целое неотрицательное число. Разрешая последнее уравнение относительно E , получаем следующее выражение для положительно частотного спектра собственных значений:

$$E_{nj}^{(\pm)} = \frac{m_0 c^2 (n + s_{\pm} + 1)}{\sqrt{(n + s_{\pm} + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}}. \quad (12.76)$$

Волновые функции, отвечающие двум значениям параметра s_{\pm} , имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{njm}^{(1)}(\mathbf{r}) &= C_1 \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} \\ -\zeta \Omega_{jl+1m}^{(2)} \end{pmatrix} G(-n, s_+, r), \\ \Psi_{njm}^{(2)}(\mathbf{r}) &= C_2 \begin{pmatrix} -\zeta \Omega_{jlm}^{(1)} \\ \Omega_{jl+1m}^{(2)} \end{pmatrix} G(-n, s_-, r), \end{aligned} \quad (12.77)$$

где $C_{1,2}$ — константы нормировки.

Случай $j = l - 1/2$ не требует отдельного рассмотрения. Действительно, систему уравнений (12.68а, б) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - (j - 1/2)(j + 1/2)}{r^2} \right] f_1 &= -\frac{Z_1 \alpha}{r^2} g_1, \\ \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - (j + 1/2)(j + 3/2)}{r^2} \right] g_1 &= \frac{Z_1 \alpha}{r^2} f_1, \end{aligned} \quad (12.78)$$

а систему уравнений (12.69а, б) — в виде

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - (j + 1/2)(j + 3/2)}{r^2} \right] f_2 &= \frac{Z_1 \alpha}{r^2} g_2, \\ \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \kappa^2 + \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - (j - 1/2)(j + 1/2)}{r^2} \right] g_2 &= -\frac{Z_1 \alpha}{r^2} f_2. \end{aligned} \quad (12.79)$$

Таким образом, учитывая (12.67), в случае $j = l - 1/2$ получаем

$$\begin{aligned} \Psi_{njm}^{(3)}(\mathbf{r}) &= C_3 \begin{pmatrix} -\zeta \Omega_{jlm}^{(2)} \\ \Omega_{j, l-1, m}^{(1)} \end{pmatrix} G(-n, s_+, r), \\ \Psi_{njm}^{(4)}(\mathbf{r}) &= C_4 \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(2)} \\ -\zeta \Omega_{j, l-1, m}^{(1)} \end{pmatrix} G(-n, s_-, r), \end{aligned} \quad (12.80)$$

где s_{\pm} и ζ , как функции полного углового момента j , определяются теми же выражениями.

Как несложно видеть, одно из двух решений, (12.77) или (12.80), является решением с положительной нормой волновой функции, а второе — с отрицательной. Действительно, например, для заряда частицы в состояниях (12.77) получаем

$$\frac{1}{q_0} \int \rho^{(1,2)}(\mathbf{r}) dV = \pm \frac{1}{m_0 c^2} (1 - \zeta^2) \int \left(E_{nj}^{(\pm)} + \frac{Ze^2}{r} \right) |G(-n, s_{\pm}, r)|^2 r^2 dr. \quad (12.81)$$

Учитывая, что константа ζ пропорциональна постоянной тонкой структуры α , несложно видеть, что решение $\Psi^{(1)}$ соответствует положительно заряженной частице, а решение $\Psi^{(2)}$ — отрицательно заряженной. Для решений (12.80) аналогично получаем, что решение $\Psi^{(3)}$ отвечает заряду $q = -q_0$, а решение $\Psi^{(4)}$ — заряду $q = q_0$. Решениям с противоположным знаком нормы волновой функции отвечает и противоположное значение энергии частицы

$$E = \frac{E_n}{m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_n(\mathbf{r}) (E_n - U(\mathbf{r})) \Psi_n(\mathbf{r}) dV,$$

несложно видеть, что решениям $\Psi^{(1,4)}$ отвечает положительная энергия, а решениям $\Psi^{(2,3)}$ — отрицательная.

Состояния материального поля с положительной нормой волновой функции мы связали с состояниями частицы, а состояния с отрицательной нормой — с состояниями античастицы. Вместе с тем вышеприведенные формулы влекут за собой очень важные следствия. С одной стороны, состояния частицы и античастицы являются симметричными (т. е. в определенной степени идентичными), поскольку, например, для состояний с $j = 1/2$ получаем

$$\begin{aligned} \Psi_{n, 1/2, m}^{(1)}(\mathbf{r}) &= C_{ns_+} \begin{pmatrix} \Omega_{1/2, 0, m}^{(1)} \\ -\zeta \Omega_{1/2, 1, m}^{(2)} \end{pmatrix} G(-n, s_+, r), \\ \Psi_{n, 1/2, m}^{(2)}(\mathbf{r}) &= C_{ns_-} \begin{pmatrix} -\zeta \Omega_{1/2, 0, m}^{(1)} \\ \Omega_{1/2, 1, m}^{(2)} \end{pmatrix} G(-n, s_-, r), \\ \Psi_{n, 1/2, m}^{(3)}(\mathbf{r}) &= C_{ns_+} \begin{pmatrix} -\zeta \Omega_{1/2, 1, m}^{(2)} \\ \Omega_{1/2, 0, m}^{(1)} \end{pmatrix} G(-n, s_+, r), \\ \Psi_{n, 1/2, m}^{(4)}(\mathbf{r}) &= C_{ns_-} \begin{pmatrix} \Omega_{1/2, 1, m}^{(2)} \\ -\zeta \Omega_{1/2, 0, m}^{(1)} \end{pmatrix} G(-n, s_-, r). \end{aligned}$$

Так как параметр s_{\pm} зависит лишь от величины полного углового момента, т. е. $s_{\pm} = s_{\pm}(j)$ одинаково в случае (12.77) и (12.80), то волновым функциям $\Psi^{(1)}$ и $\Psi^{(3)}$ соответствует одно и то же собственное значение (12.76). Однако, с другой стороны, волновым функци-

ям (12.77) при этом соответствует значение $l = 0$, а волновым функциям (12.80) — значение $l = 1$, т. е. состояния частицы и античастицы, отвечающие одному и тому же собственному значению, характеризуются различными квантовыми числами. Это обусловлено тем, что состояниям частицы и античастицы отвечают противоположные направления спина. Поскольку $\Psi^{(3)} = -\gamma_5 \Psi^{(1)}$, то этим двум состояниям материального поля отвечает одинаковое по величине, но противоположное по знаку значение энергии. Аналогично связаны волновые функции $\Psi^{(4)}$ и $\Psi^{(2)}$.

Таким образом, четыре линейно независимых решения (12.77)–(12.80) образуют четыре ортогональных квартионных состояния частицы в кулоновском поле для каждого значения величины полного углового момента j . Два из указанных квартионов отвечают состоянию частицы, а оставшиеся два — состоянию античастицы.

Итак, положительно частотные состояния, отвечающие уровням электрона в притягивающем кулоновском потенциале, описываются следующими волновыми функциями:

$$\begin{aligned}\Psi_{njm}^{(l=j-1/2)}(\mathbf{r}) &= C_1 \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} \\ -\zeta_j \Omega_{jl+1m}^{(2)} \end{pmatrix} G(-n, s_+, r), \\ \Psi_{njm}^{(l=j+1/2)}(\mathbf{r}) &= C_2 \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(2)} \\ -\zeta_j \Omega_{jl-1m}^{(1)} \end{pmatrix} G(-n, s_-, r),\end{aligned}\quad (12.82)$$

соответствующие им собственные значения имеют вид

$$E_{nj}^{(l=j\mp 1/2)} = \frac{m_0 c^2 (n + s_{\pm} + 1)}{\sqrt{(n + s_{\pm} + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}}. \quad (12.83)$$

Отметим, что при заданной величине j два решения (12.82) имеют противоположную четность, поскольку $l_1 = j - 1/2$ и $l_2 = j + 1/2$.

Нормированные биспиноры волновых функций (12.82) имеют вид

$$\begin{aligned}\Psi_{jm}^{(l=j-1/2)}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{1 - \zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} \\ -\zeta_j \Omega_{jl+1m}^{(2)} \end{pmatrix}, \\ \Psi_{jm}^{(l=j+1/2)}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{1 - \zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(2)} \\ -\zeta_j \Omega_{jl-1m}^{(1)} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (12.84)$$

а нормированные радиальные функции

$$\begin{aligned}R_{n,j,l=j\mp 1/2}^{(1)} &= 2\kappa^{3/2} \sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n + 2s_{\pm} + 2) \sqrt{(n + s_{\pm} + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}}} \times \\ &\quad \times L_n^{(2s_{\pm} + 1)}(2\kappa r) \exp(-\kappa r) (2\kappa r)^{s_{\pm}},\end{aligned}\quad (12.85)$$

где $\kappa = \kappa(n, j, l)$, а $L_n^{(a)}(x)$ — полиномы Лагерра. Как видно, характерный пространственный масштаб изменения волновых функций (12.85) определяется обратной величиной параметра κ , для которого с учетом (12.83) получаем

$$\kappa = \frac{Z}{a_B} \frac{1}{\sqrt{(n+s+1)^2 + Z^2\alpha^2}},$$

где a_B — боровский радиус, определяемый выражением

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}.$$

Используя эти соотношения, константу нормировки радиальной волновой функции (12.85) можно записать также в виде

$$\begin{aligned} 2\kappa^{3/2} \sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n+2s+2)\sqrt{(n+s+1)^2 + Z^2\alpha^2}}} &= \\ &= \frac{2}{(n+s+1)^2 + Z^2\alpha^2} \sqrt{\left(\frac{Z}{a_B}\right)^3 \frac{n!}{\Gamma(n+2s+2)}}. \end{aligned}$$

12.4.3. Релятивистские поправки: тонкая и сверхтонкая структура стандартного спектра состояний

а) Предельный переход $\alpha \rightarrow 0$. Рассмотрим, как преобразуются формулы (12.83)–(12.85) при предельном переходе $\alpha \rightarrow 0$. Из (12.83) следует, что энергия связанных состояний электрона в поле кулоновского потенциала имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta E_{nj}^{(l=j\mp 1/2)} &= m_0 c^2 - E_{nj}^{(l=j\mp 1/2)} = \\ &= \frac{m_0 c^2}{(n+s_{\pm}+1)^2} \frac{Z^2 \alpha^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n+s_{\pm}+1)^2}} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n+s_{\pm}+1)^2}}\right)}. \end{aligned}$$

При $\alpha = 0$ параметры γ_{\pm} принимают вид

$$\gamma_{\pm} = \begin{cases} -(j-1/2)(j+1/2), & j = l + 1/2, \\ -(j+3/2)(j+1/2), & j = l - 1/2. \end{cases}$$

Соответственно, для параметров s_{\pm} получаем

$$s_{\pm} = \begin{cases} j - 1/2 = l, & j = l + 1/2, \\ j + 1/2 = l, & j = l - 1/2. \end{cases}$$

Вводя главное квантовое число

$$n_p = n + l + 1,$$

для спектра излучения получаем

$$\Delta E_{n_p} = \frac{m_0 c^2 Z^2 \alpha^2}{2n_p^2} = \frac{m_0 Z^2 e^4}{2n_p^2}. \quad (12.86)$$

Таким образом, характерная величина энергии связи электрона, находящегося в основном состоянии ($n = 0, l = 0$), при $Z\alpha \ll 1$ определяется выражением

$$\Delta E_{0,1/2}^{(l=0)} \approx I_0 = Z^2 \frac{m_0 c^4}{2\hbar^2} = Z^2 Ry,$$

где Ry — атомная единица энергии, называемая *ридбергом*.

Нормированная радиальная волновая функция (12.85) в этом случае принимает вид

$$f_{nl}(r) = \frac{2}{n_p^2} \sqrt{\left(\frac{Z}{a_B}\right)^3 \frac{(n_p - l - 1)!}{(n_p + l)!}} L_{n_p - l - 1}^{(2l+1)}(2\kappa r) \exp(-\kappa r) (2\kappa r)^l. \quad (12.87)$$

Как видно, спектр (12.86) и радиальная волновая функция (12.87) совпадают со спектром и радиальной волновой функцией уравнения Шредингера.

Угловая часть волновых функций (12.82) превращается из биспинора в спинор, поскольку $\zeta = 0$. Однако в рамках нерелятивистской теории Паули энергетический спектр состояний частицы с полуцелым спином в кулоновском поле от проекции спина не зависит. Решение двухчастичной задачи о взаимодействии двух противоположно заряженных частиц с полуцелым спином позволяет рассчитать поправки к энергетическому спектру, связанные с наличием спина (см. [12]).

б) Предельный переход $\mu_0 = \mu_B$. Второй предельный переход, представляющий интерес для интерпретации спектра (12.83), состоит в переходе к пределу $\mu_0 = \mu_B$, поскольку, как мы отмечали в разделе 7.2, решения уравнения (7.2) должны совпадать с решениями квадратированного уравнения Дирака. Итак, полагая $\mu_0 = \mu_B$, для значений параметра γ_{\pm} , определяемого (12.73), получаем

$$\gamma_{\pm} = -(j + 1/2)^2 + Z^2 \alpha^2 \pm \sqrt{(j + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2}.$$

Соответственно s_{\pm} имеет в этом случае вид

$$s_{\pm} = \begin{cases} \sqrt{(j + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} - 1 = \sqrt{(l + 1)^2 - Z^2 \alpha^2} - 1, & j = l + 1/2, \\ \sqrt{(j + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} = \sqrt{l^2 - Z^2 \alpha^2}, & j = l - 1/2. \end{cases} \quad (12.88)$$

Для энергии состояний из (12.83) получаем

$$E_{nj}^{(l=j-1/2)} = \frac{m_0 c^2 \left(n + \sqrt{(l+1)^2 - Z^2 \alpha^2} \right)}{\sqrt{\left(n + \sqrt{(l+1)^2 - Z^2 \alpha^2} \right)^2 + Z^2 \alpha^2}}, \quad (12.89a)$$

$$E_{nj}^{(l=j+1/2)} = \frac{m_0 c^2 \left(n + 1 + \sqrt{l^2 - Z^2 \alpha^2} \right)}{\sqrt{\left(n + 1 + \sqrt{l^2 - Z^2 \alpha^2} \right)^2 + Z^2 \alpha^2}}. \quad (12.89b)$$

Сравнивая формулы (12.83) и (12.49), мы видим, что принципиальное отличие (12.83) от (12.49) состоит в том, что спектр (12.49) зависит лишь от величины полного углового момента (см. (12.88)) и не зависит от взаимной ориентации орбитального момента \mathbf{l} и спина \mathbf{s} . Например, из (12.49) для энергии $2s_{1/2}$ -состояния получаем выражение

$$E(2s_{1/2}) = E_{nj}^{(l=j-1/2)} \Big|_{n=1, j=1/2} = \frac{m_0 c^2 \left(1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} \right)}{\sqrt{\left(1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} \right)^2 + Z^2 \alpha^2}},$$

которое совпадает с выражением для энергией $2p_{1/2}$ -состояния:

$$E(2p_{1/2}) = E_{nj}^{(l=j+1/2)} \Big|_{n=0, j=1/2} = \frac{m_0 c^2 \left(1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} \right)}{\sqrt{\left(1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} \right)^2 + Z^2 \alpha^2}}.$$

Напротив, спектр (12.83) зависит от взаимной ориентации орбитального углового момента и спина. Это означает, что состояния с одинаковым значением j и разным значением l будут иметь различную энергию. Например, в водородоподобном атоме появляется лэмбовский сдвиг, т.е. сдвиг энергии $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$. Отметим, что лэмбовский сдвиг по историческим причинам обычно связывается со сдвигом $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -уровней, однако, как хорошо известно (см. обзоры [25–27, 57]), аналогичное расщепление возникает и для других (вырожденных в рамках нерелятивистской теории) состояний водородоподобного атома. Действительно, параметр γ_{\pm} , определяемый выражением (12.73) и определяющий величину параметра s_{\pm} в формуле (12.83), для $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -состояний имеет вид

$$\begin{aligned} \gamma_+(2s_{1/2}) &= (Z\alpha)^2 - 1 + \sqrt{1 - (Z_1\alpha)^2}, \\ \gamma_-(2p_{1/2}) &= (Z\alpha)^2 - 1 - \sqrt{1 - (Z_1\alpha)^2}. \end{aligned}$$

Поэтому состояния $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ согласно (12.83) имеют различную энергию. Приведенные выше соотношения показывают, что в рамках теории, основанной на уравнении (7.2), возникает сверхтонкая структура атомных спектров, связанная с различием собственных значений

состояний с одинаковым \mathbf{j} , но различными \mathbf{l} и s . Это отличие связано с тем, что волновые функции указанных состояний, как видно из (12.82), являются суперпозициями различных квартионных состояний.

Естественно, что, так же как и в теории, основанной на использовании уравнения Дирака, в спектре (12.83) имеется и тонкая структура атомных спектров, поскольку

$$\gamma_+ (2p_{3/2}) = (Z\alpha)^2 - 4 + \sqrt{4 - (Z_1\alpha)^2}.$$

Таким образом, формула (12.83) показывает наличие сдвига $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -уровней.

Итак, мы видим, что в пределе $\mu_0 \rightarrow \mu_B$ полученные формулы тождественно совпадают с формулами, полученными впервые Дарвином [14] и Гордоном [15] из решения уравнения Дирака.

в) Природа лэмбовского сдвига. Приведенный выше расчет стандартного спектра связанных состояний электрона в кулоновском поле позволяет дать простую и наглядную интерпретацию механизмов появления сверхтонкой структуры в атоме водорода. Введем для краткости следующее обозначение волновых функций (12.82):

$$\Psi^{(\pm)} = \Psi_{njm}^{(j=l\pm 1/2)}(\mathbf{r}) = C_{njm} \begin{pmatrix} u_{jlm} \\ i^{\pm 1} \zeta \sigma_r u_{jlm} \end{pmatrix} F(-n, \nu_{\pm}, r), \quad (12.90)$$

где u_{jlm} — один из спиноров (12.44) и мы воспользовались соотношениями (12.45). Пользуясь полученными выше решениями, несложно определить явный вид вектора электрической поляризации \mathbf{P} для электрона, движущегося в кулоновском поле. Подставляя (12.90) в (7.21), получаем

$$\mathbf{P}^{(\pm)} = -i\mu_0 \overline{\Psi}^{(\pm)} \boldsymbol{\alpha} \Psi^{(\pm)} = \pm e_r \frac{2|\mu_0|\zeta}{1-\zeta^2} \overline{\Psi}^{(\pm)} \Psi^{(\pm)}. \quad (12.91)$$

Таким образом, слагаемое в гамильтониане уравнения (9.26), описывающее взаимодействие вектора электрической поляризации электрона с внутриатомным полем $\mathbf{E}_a = \mathbf{e}_r (e/r^2)$, принимает вид

$$\Delta E_{PE}^{(j=l\pm 1/2)} = - \int \mathbf{P}^{(\pm)} \mathbf{E}_a dV = \pm \frac{2|\mu_0 e|\zeta}{1-\zeta^2} \int \overline{\Psi}^{(\pm)} \Psi^{(\pm)} dr d\Omega. \quad (12.92)$$

Следовательно, при заданном j выше энергия уровня с меньшим l . В частности, уровни $nS_{1/2}$ лежат выше $nP_{1/2}$ -уровней.

Таким образом, мы видим, что механизм лэмбовского сдвига уровней водородоподобных атомов с нулевым спином ядра (например, иона гелия ${}^4\text{He}^{+1}$) состоит во взаимодействии вектора электрической поляризации электрона с внутриатомным электрическим полем. На рис. 12.2 схематически показано взаимное расположение вектора напряженности электрического поля, создаваемого ядром атома $\mathbf{E} = e\mathbf{r}/r^3$, и вектора электрической поляризации электрона в $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояниях.

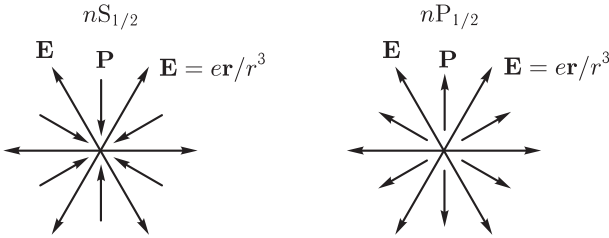


Рис. 12.2. Взаимное расположение вектора напряженности электрического поля, создаваемого ядром атома $\mathbf{E} = e\mathbf{r}/r^3$, и вектора электрической поляризации электрона \mathbf{P} в $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояниях

Проведенные выше расчеты показывают, что наличие релятивистского слагаемого $a_0^2\varphi^2$ в уравнении (7.2), так же как и в случае скалярных полей, приводит к сдвигу уровней, отличающихся величиной углового момента. При этом, ввиду наличия внутренних степеней свободы спинорного поля, величина сдвига уровней отличается от указанных сдвигов для скалярного поля. Принципиально новой чертой спектра (12.83) является появление сверхтонкой структуры. Этот эффект не связан лишь с появлением в волновом уравнении спинорного поля дополнительных (по сравнению с уравнением КГФ) слагаемых, описывающих движение по внутренним степеням свободы. Действительно, спектр (12.89а, б), следующий из решения квадрированного уравнения Дирака (7.7), является вырожденным по величине полного углового момента. Наличие лэмбовского сдвига неоспоримо свидетельствует о том, что магнитный момент частицы отличается от величины магнитного момента, обусловленного орбитальным движением частицы как целого, и близость магнитного момента электрона к величине магнетона Бора является либо случайной, либо свидетельствует о наличии у него внутренней структуры.

12.4.4. Сверхтонкая структура атомных спектров: сравнение с экспериментом. В предыдущих разделах мы показали, что в отличие от уравнения Дирака уравнение (7.2) предсказывает расщепление энергии уровней с одинаковыми значениями полного углового момента j и различными значениями орбитального момента l (лэмбовский сдвиг).

Однако, как мы уже отмечали в предыдущих главах, задача о движении электрона в кулоновском поле не эквивалентна задаче об атоме водорода, поскольку задача об атоме водорода является двухчастичной задачей. Результаты расчетов, проведенных в гл. 6, показали, что наибольший сдвиг наблюдается для состояний с $l = 0$ и поправки спадают с увеличением орбитального углового момента. Следовательно, частоты переходов с уровней $l_i = 0$ на уровни $l_f > 0$, полученные из решения задачи о движении электрона в кулоновском поле, будут в наибольшей степени отличаться от экспериментально измеренных частот переходов

в атоме водорода. С другой стороны, частоты переходов между уровнями с $l_i > 0$ и $l_f > 0$ могут оказаться гораздо ближе к экспериментально измеряемым частотам.

Проведем сравнение энергетического спектра электрона в кулоновском поле $E_{nj}^{(l)}$ (формула (12.83)) со спектром E_{nj} (формулы (12.89а, б)), полученным из решения уравнения Дирака для той же задачи. Сдвиги линий двух спектров удобно выразить в виде разложения по постоянной тонкой структуры α . Для сдвигов уровней $\Delta E = E - E_D$ получаем

$$\begin{aligned} \frac{\Delta E(nS_{1/2})}{m_0 c^2} &= \frac{\gamma_e^2 - 1}{2n_p^3} (Z\alpha)^4 + \\ &+ \frac{\gamma_e^2 - 1}{8n_p^5} [(7 - \gamma_e^2) n_p^2 + 3(3 - \gamma_e^2) n_p - 6] (Z\alpha)^6 + \dots, \\ \frac{\Delta E(nP_{1/2})}{m_0 c^2} &= -\frac{\gamma_e^2 - 1}{6n_p^3} (Z\alpha)^4 - \\ &- \frac{\gamma_e^2 - 1}{216n_p^5} [(19 + 11\gamma_e^2) n_p^2 + 9(5 + \gamma_e^2) n_p - 54] (Z\alpha)^6 + \dots, \\ \frac{\Delta E(nP_{3/2})}{m_0 c^2} &= \frac{\gamma_e^2 - 1}{12n_p^3} (Z\alpha)^4 + \\ &+ \frac{\gamma_e^2 - 1}{1728n_p^5} [(37 + 5\gamma_e^2) n_p^2 + 18(7 - \gamma_e^2) n_p - 216] (Z\alpha)^6 + \dots, \end{aligned} \quad (12.93)$$

где $n_p = n + l + 1$ — главное квантовое число.

Из (12.93) видно, что первая не исчезающая поправка пропорциональна $\alpha^4 (\gamma_e^2 - 1)$. Учитывая, что $m_0 c^2 \alpha^2 = 2Ry$, мы видим, что первое слагаемое в правых частях (12.93) имеет характерную для сверхтонких сдвигов зависимость $Z^4 \alpha^2 / n_p^3$. Уровни $nS_{1/2}$ и $nP_{3/2}$ сдвигаются вверх относительно их положения в теории Дирака, а уровень $nP_{1/2}$ сдвигается вниз. Это полностью соответствует экспериментально наблюдаемым зависимостям.

Для лэмбовского сдвига получаем

$$\Delta E_L(nS_{1/2} - nP_{1/2}) = \frac{3(\gamma_e^2 - 1)}{4n^3} m_0 c^2 Z^4 \alpha^4.$$

Учитывая, что экспериментально измеряемая величина магнитного момента электрона хорошо аппроксимируется формулой $\gamma_e = \mu_e / \mu_B \approx (1 + \alpha/2\pi)$, получаем

$$\Delta E_L = \frac{3m_0 c^2 Z^4 \alpha^5}{2\pi n^3} + \dots$$

Возможность полного согласования рассчитываемых и экспериментальных данных можно проиллюстрировать на примере проведенного

в [11, 12] прецизионного измерения тонкой структуры энергетических уровней $8d_{5/2} - 8d_{3/2}$ и $12d_{5/2} - 12d_{3/2}$ атома водорода. При расчете положения уровней в атоме водорода формулу (12.83) удобно привести к следующему виду:

$$\begin{aligned} \Delta E_{nj}^{(l=j\mp 1/2)} &= m_0 c^2 - E_{nj}^{(l=j\mp 1/2)} = \\ &= \frac{m_0 c^2 Z^2 \alpha^2}{(n + \nu_{\pm})^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n + \nu_{\pm})^2}} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n + \nu_{\pm})^2}} \right)}. \end{aligned}$$

Учитывая, что

$$m_e c^2 \alpha^2 = 4\pi \hbar R_{\infty} c,$$

для положения уровня в частотных единицах получаем

$$\begin{aligned} \nu_{nl}^{(l=j\mp 1/2)} &= \\ &= \frac{2R_{\infty} c Z^2}{(n + \nu_{\pm})^2} \frac{m_n}{m_n + m_e} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n + \nu_{\pm})^2}} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n + \nu_{\pm})^2}} \right)}, \quad (12.94) \end{aligned}$$

где мы учли поправку на конечную массу ядра атома m_n . Как мы видели в гл. 6, поправка на конечную массу ядра, так же как и в нерелятивистском случае, состоит в замене массы электрона m_e на приведенную массу $m_r = m_e m_n / (m_e + m_n)$. Более подробный расчет поправок, связанных с учетом движения ядра, будет проведен в последней главе.

В табл. 12.1, 12.2 приведены значения экспериментально измеренных частот переходов $8(12)D_J - 2S_{1/2}$ в атоме водорода и дейтерия. Эти измерения позволяют определить значение частоты переходов $8(12)D_{5/2} - 8(12)D_{3/2}$. Получающиеся значения частот указанных переходов выделены жирным шрифтом. Используя следующие значения фундаментальных констант [25]: $R_{\infty} c = 3,289841960368 \times 10^{15} \text{ Hz}$, $\alpha = 0,007297352533285885$, $m_n/m_e = 1836,152667$, $\gamma_e = 1,0011596521884$, из формулы (12.94) для частот указанных переходов получаем теоретические значения, приведенные в нижних строках указанных таблиц.

Из таблиц видно, что теоретически рассчитываемые по формуле (12.94) значения частот переходов совпадают с экспериментальными данными с точностью порядка нескольких килогерц. Неполное совпадение теоретических и экспериментально измеряемых значений указывает на необходимость разработки методов решения двухчастичной задачи. Анализ задачи о взаимодействии двух частиц, подчиняющихся уравнению (7.2), будет посвящена последняя глава.

Таблица 12.1

Экспериментально измеренные значения частот $8D_J - 2S_{1/2}$ -переходов в атомах водорода и дейтерия и сравнение экспериментальных и теоретических значений частот $8D_{5/2} - 8D_{3/2}$ -переходов

<i>Эксперимент</i> [26]		
	Водород, МГц	Дейтерий, МГц
ν_0	770 649 000	770 859 000
$\nu(8D_{3/2} - 2S_{1/2}) - \nu_0$	504,4500(83)	195,7018(63)
$\nu(8D_{5/2} - 2S_{1/2}) - \nu_0$	561,5842(64)	252,8495(59)
$\nu(8D_{5/2} - 8D_{3/2})$	57,1342	57,1477
<i>Теория</i>		
$\nu(8D_{5/2} - 8D_{3/2})$	57,1293	57,14487

Таблица 12.2

Экспериментально измеренные значения частот $12D_J - 2S_{1/2}$ -переходов в атомах водорода и дейтерия и сравнение экспериментальных и теоретических значений частот $12D_{5/2} - 12D_{3/2}$ -переходов

<i>Эксперимент</i> [26]		
	Водород, МГц	Дейтерий, МГц
ν_0	799 191 000	799 409 000
$\nu(12D_{3/2} - 2S_{1/2}) - \nu_0$	710,4727(93)	168,0380(86)
$\nu(12D_{5/2} - 2S_{1/2}) - \nu_0$	727,4037(70)	184,9668(68)
$\nu(12D_{5/2} - 12D_{3/2})$	16,931	16,9288
<i>Теория</i>		
$\nu(12D_{5/2} - 12D_{3/2})$	16,9272	16,9318

12.5. Базис волновых функций отрицательно частотной зоны состояний частицы в кулоновском поле (связанные состояния зеркальных частиц)

В разделе 5.4 мы показали, что наличие в уравнении КГФ слагаемого вида $q_0^2 \varphi^2(\mathbf{r})$ приводит к качественно новым явлениям, обусловленным тем, что на расстояниях, меньших половины классического радиуса электрона, эффективная потенциальная энергия становится отрицательной и в отталкивающем кулоновском поле. В случае скалярного поля это приводит к тому, что в одном и том же кулоновском поле одновременно возникает спектр связанных состояний как частиц, так и зеркальных частиц. Поскольку трансляционная часть уравнения (7.2)

совпадает по виду с уравнением КГФ, то следует ожидать, что аналогичная ситуация имеет место и в случае спиновых полей.

12.5.1. Радиальная волновая функция. Обратимся теперь ко второму линейно независимому решению для радиальной волновой функции, определяемому вторым слагаемым в формуле (12.70):

$$G_2(\xi, s, r) = \exp(-\kappa r)r^{-(s+1)}F\left(-\frac{EZ\alpha}{\hbar c\kappa} - s, -2s, 2\kappa r\right). \quad (12.95)$$

Условие обращения в нуль радиальных волновых функций на бесконечности принимает теперь вид

$$\frac{EZ\alpha}{\hbar c\kappa} + s = n, \quad (12.96)$$

где n — целое неотрицательное число. Из (12.96) получаем следующий спектр собственных значений:

$$E_{nj}^{(l=j\mp 1/2)} = \frac{m_0c^2(n - s_{\pm})}{\sqrt{(n - s_{\pm})^2 + Z^2\alpha^2}}. \quad (12.97)$$

Несложно видеть, что, так же как и в случае скалярных полей, спектр (12.97) содержит как положительные ($n > s_{\pm}$), так и отрицательные ($n < s_{\pm}$) собственные значения.

В предыдущих главах мы связали волновую функцию с положительной нормой с состоянием частицы, а волновую функцию с отрицательной нормой — с состоянием зеркальных частиц. Однако у нас остается свобода выбора, какую волновую функцию состояний отрицательно частотной зоны связать с состоянием зеркальной частицы, а какую — с состоянием зеркальной античастицы. Этот выбор влияет лишь на то, состояние с какими квантовыми числами мы будем связывать с состояниями зеркальных частиц, а с какими — с состояниями зеркальных античастиц, однако на физические свойства частиц, находящихся в указанных состояниях, этот выбор влияния не оказывает. Действительно, мы видели, что состояния стандартного спектра, отвечающие одному и тому же собственному значению, в случае частицы и античастицы отличаются по величине углового момента, что связано с противоположным направлением спинов частицы и античастицы. При записи выражения для спектра (12.97) мы положили, что состояниям зеркальной частицы отвечают волновые функции (12.82) при соответствующей замене радиальных волновых функций:

$$\begin{aligned} \Psi_{njm}^{(l=j-1/2)}(\mathbf{r}) &= C_1 \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} \\ -\zeta_j \Omega_{jl+1m}^{(2)} \end{pmatrix} G_2(-n, s_+, r), \\ \Psi_{njm}^{(l=j+1/2)}(\mathbf{r}) &= C_2 \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(2)} \\ -\zeta_j \Omega_{jl-1m}^{(1)} \end{pmatrix} G_2(-n, s_-, r). \end{aligned} \quad (12.98)$$

При выполнении условия (12.96) волновая функция (12.95) принимает вид

$$R_{n,j,l=j\mp 1/2}^{(2)}(r) = C_2 L_n^{(-2s_{\pm}-1)}(2\kappa r) \exp(-\kappa r) r^{-(s_{\pm}+1)}. \quad (12.99)$$

Нормированные угловые волновые функции имеют вид (12.84), а радиальная волновая функция (12.99) совпадает с волновой функцией (5.73) для случая скалярных полей, поэтому, пользуясь результатами раздела 5.4.1, для нормированной радиальной волновой функции получаем

$$R_{n,j,l=j\mp 1/2}^{(2)}(r) = 2\kappa^{3/2} \sqrt{\frac{n!}{|\Gamma(n-2s_{\pm})|}} \frac{1}{\sqrt{(n-s_{\pm})^2 + Z^2\alpha^2}} \times \\ \times L_n^{(-2s_{\pm}-1)}(2\kappa r) \exp(-\kappa r) (2\kappa r)^{-(s_{\pm}+1)}. \quad (12.100)$$

Так же как и в случае скалярных полей, норма волновой функции (12.100) является конечной, если $n - 2s_{\pm}$ не является нулем или целым отрицательным числом. Следовательно, параметр s_{\pm} не должен быть целым или полуцелым числом.

Определим возможности обращения параметра s_{\pm} в целое или полуцелое число при изменении заряда ядра Z . Решение уравнения

$$s_{\pm}(Z) = p \quad (12.101)$$

имеет вид

$$Z_i \alpha = \left[(j+1/2)^2 - \frac{\gamma_e^2}{2} - p(p+1) \pm \right. \\ \left. \pm \sqrt{\gamma_e^2 p(p+1) + \frac{\gamma_e^4}{4} - (j+1/2)^2 (\gamma_e^2 - 1)} \right]^{1/2}. \quad (12.102)$$

При $p = 0$ расходящейся становится норма волновых функций (12.100), отвечающих значению квантового числа $n = 0$. При $p = 1/2$ расходящейся становится норма волновых функций, отвечающих квантовым числам $n = 0$ и $n = 1$.

Особым является также и значение $s_{\pm}(Z) = -1/2$, поскольку при $4\gamma_{\pm} > 1$ становится комплексным параметр s_{\pm} , а следовательно, комплексными становятся собственные значения (12.83) и (12.97).

Введем квантовые числа (n_1, l_1, j_1) для обозначения состояний спектра (12.83) и (n_2, l_2, j_2) — для обозначения состояний спектра (12.97). На рис. 12.3 показан интегральный спектр состояний (т.е. спектр, включающий, как собственные значения (12.83) так и (12.97)), как функция заряда ядра Z . В целях компактности на рисунке введен верхний индекс радиального квантового числа, отвечающий соотношению $j = l \pm 1/2$, что позволяет определить величину орбитального углового момента. Вертикальные штриховые линии отмечают значения заряда ядра, определяющиеся выражением (12.102) при $p = 0, \pm 1/2$. Следует отметить, что корни Z_i , определяемые выражением (12.102),

для экспериментально измеренных отношений магнитного момента электрона к магнетону Бора γ_e не являются целыми числами. Поскольку заряд ядра водородоподобного атома или иона является дискретным целым числом, то реального пересечения уровней не происходит. Тем не менее формула (12.102) имеет принципиальное значение, поскольку целая часть значений Z_i , определяемых выражением (12.102), указывает на значение заряда ядра водородоподобного атома или иона, для которого различные собственные значения оказываются близки. Учитывая результаты предыдущего рассмотрения, можно сказать, что при указанных значениях заряда ядра атомов наиболее вероятны процессы с изменением числа частиц. Отметим, что при $j = 1/2$ корень, отвечающий $p = 1/2$, имеет значение $Z_1 \approx 118,6$, что гораздо ближе к граничной величине заряда ядра стабильных атомов, чем пороговое значение Z_0 , которое в рамках стандартной модели определяется величиной $Z_0 = 1/\alpha \approx 137$.

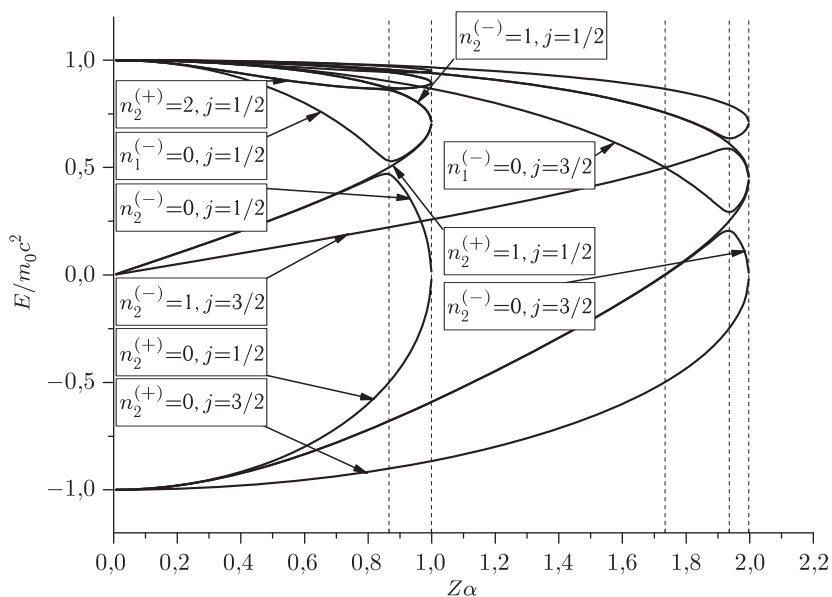


Рис. 12.3. Интегральный спектр собственных значений энергии связанных состояний частицы и зеркальной частицы в кулоновском поле как функция заряда ядра Z . Вертикальными штриховыми линиями показаны значения $Z_i\alpha$, которые определяются формулой (12.102)

12.5.2. Подзоны состояний отрицательно частотной зоны с положительными и отрицательными собственными значениями. Как видно из рис. 12.3 при $Z\alpha \ll 1$ существует определенная симметрия между величиной положительно и отрицательно частотных

собственных значений. С ростом заряда ядра эта симметрия нарушается. Поэтому обсудим характерные черты спектра собственных значений в области $Z\alpha \ll 1$. Вид спектра собственных значений существенно зависит от величины параметра s_{\pm} , который при $Z\alpha \ll 1$ имеет вид

$$s_+ = j - \frac{1}{2} - \frac{Z^2\alpha^2}{2} \frac{2j+1-\gamma_e^2}{j(2j+1)} + \dots,$$

$$s_- = j + \frac{1}{2} - \frac{Z^2\alpha^2}{2} \frac{2j+1+\gamma_e^2}{(j+1)(2j+1)} + \dots$$

Несложно видеть, что первые слагаемые в указанных разложениях совпадают и имеют вид $s_{\pm} \approx l$. Таким образом, общая структура спектра при малых значениях $Z\alpha$ близка к структуре спектра связанных состояний зеркальной скалярной частицы в кулоновском поле. В частности, собственные значения отрицательно частотной зоны состояний являются положительными числами при $n_2 > l_2$ и отрицательными в обратном случае. Случай $n_2 = l_2$ требует отдельного рассмотрения.

Сравним энергии связи $\Delta E_{nj}^{(l)} = m_0c^2 - E_{nj}^{(l)}$, отвечающие состояниям спектров (12.83) и (12.97). Первые члены асимптотических разложений спектров (12.83) по малому параметру $Z\alpha \rightarrow 0$ имеют вид

$$\frac{\Delta E(n_1, l_1, j_1 = l_1 + 1/2)}{m_0c^2} = \frac{Z^2\alpha^2}{2(n_1 + j_1 + 1/2)^2} + \frac{Z^4\alpha^4}{8(n_1 + j_1 + 1/2)^4} \times$$

$$\times \frac{(4n_1 + j_1 + 2)(j_1 + 1/2) - \gamma_e^2(2n_1 + 2j_1 + 1)}{(j_1 + 1/2)j_1} + \dots, \quad (12.103a)$$

$$\frac{\Delta E(n_1, l_1, j_1 = l_1 - 1/2)}{m_0c^2} = \frac{Z^2\alpha^2}{2(n_1 + j_1 + 3/2)^2} + \frac{Z^4\alpha^4}{8(n_1 + j_1 + 3/2)^4} \times$$

$$\times \frac{(4n_1 + j_1 + 3)(j_1 + 1/2) + \gamma_e^2(2n_1 + 2j_1 + 3)}{(j_1 + 1/2)(j_1 + 1)} + \dots \quad (12.103b)$$

Аналогичные разложения для состояний спектра (12.97) имеют вид

$$\frac{\Delta E(n_2, l_2, j_2 = l_2 + 1/2)}{m_0c^2} = \frac{Z^2\alpha^2}{2(n_2 - j_2 + 1/2)^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{8(n_2 - j_2 + 1/2)^4} \times$$

$$\times \frac{(4n_2 - j_2 + 2)(j_2 + 1/2) - \gamma_e^2(2n_2 - 2j_2 + 1)}{(j_2 + 1/2)j_2} + \dots, \quad (12.104a)$$

$$\frac{\Delta E(n_2, l_2, j_2 = l_2 - 1/2)}{m_0c^2} = \frac{Z^2\alpha^2}{2(n_2 - j_2 - 1/2)^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{8(n_2 - j_2 - 1/2)^4} \times$$

$$\times \frac{(4n_2 - j_2 + 1)(j_2 + 1/2) + \gamma_e^2(2n_2 - 2j_2 + 1)}{(j_2 + 1/2)(j_2 + 1)} + \dots \quad (12.104b)$$

Несложно видеть, что разложения (12.103а, б) и (12.104а, б) обладают зеркальной симметрией, состоящей в том, что формальная замена

$n_2 \rightarrow n_1$ и $j_2 \rightarrow -(j_1 + 1)$ приводит выражение (12.104а) к виду выражения (12.103б), т. е.

$$\begin{aligned} \Delta E(n_2 = n_1, l_2 = j_2 - 1/2, j_2 = -(j_1 + 1)) = \\ = \Delta E(n_1, l_1 = j_1 + 1/2, j_1). \end{aligned} \quad (12.105)$$

В свою очередь при аналогичной замене выражение (12.104б) переходит в выражение (12.103а):

$$\begin{aligned} \Delta E(n_2 = n_1, l_2 = j_2 + 1/2, j_2 = -(j_1 + 1)) = \\ = \Delta E(n_1, l_1 = j_1 - 1/2, j_1). \end{aligned} \quad (12.106)$$

Обратимся к уровням подзоны отрицательно частотных решений с положительными собственными значениями, для которых $n_2 > l_2$. На рис. 12.4 схематически изображена структура ряда низколежащих уровней положительно частотной зоны в сравнении с рядом уровней подзоны отрицательно частотных решений с положительными собственными значениями. Представленная схема не отражает реальных сдвигов уровней, а лишь их взаимное расположение. Это обусловлено тем, что в рамках линейной шкалы энергий невозможно наглядно отразить одновременно тонкую и сверхтонкую структуру уровней. Во взаимном расположении положительно и отрицательно частотных собственных значений несложно видеть общие черты со случаем скалярной частицы, для которой аналогичная схема представлена на рис. 5.10. Общие черты состоят в том, что вблизи уровней, характеризующихся в рамках нерелятивистской теории главным квантовым числом $p = n_1 + l_1 + 1$, возникает структура уровней отрицательно частотной зоны, характеризующаяся квантовыми числами ($n_2, l_2 = n_2 - p$), где $n_2 > n_1$. Зеркальная симметрия между собственными значениями положительно и отрицательно частотных зон проявляется, во-первых, в том, что если для уровней положительно частотной зоны, характеризующихся одними и теми же значениями радиального квантового числа n_1 и углового момента l_1 , величина собственного значения растет с ростом величины полного углового момента j_1 , то для состояний отрицательно частотной зоны имеет место противоположная ситуация. Величина собственного значения состояний, характеризующихся одними и теми же значениями радиального квантового числа n_2 и углового момента l_2 , падает с ростом величины полного углового момента j_2 . Во-вторых, как следует из соотношений (12.105) и (12.106), при обсуждавшейся выше формальной замене совпадающими оказываются состояния, отвечающие противоположному направлению спина. Выше было показано, что в стандартном спектре состояний одно и то же собственное значение отвечает частице и античастице, имеющим противоположно направленные спины. Напомним, что при этом состоянии и частицы, и зеркальной частицы мы связываем с одной и той же парой квантовых чисел, имеющих положительную норму.

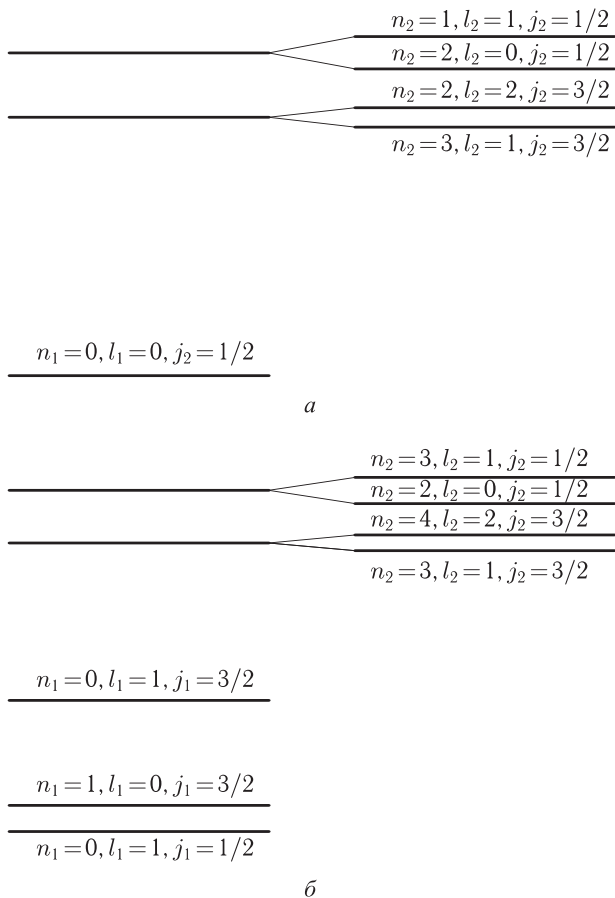


Рис. 12.4. Схематическая диаграмма ряда собственных значений энергии положительно (n_1, l_1, j_1) и отрицательно (n_2, l_2, j_2) частотных состояний частицы в кулоновском поле

Итак, вблизи каждого из стационарных состояний частицы в кулоновском поле возникает инвертированный спектр состояний зеркальной частицы (или античастицы). Так же как и в случае скалярной частицы, состояния частицы и зеркальной частицы имеют различную область пространственной локализации. При $Z = 1$ пространственный масштаб распределения плотности заряда в состояниях стандартного базиса определяется радиусом Бора a_B , а волновые функции $R_{nlj}^{(2)}$ являются сингулярными в нуле. На рис. 12.5 показаны в сравнении пространственные профили $R_{nlj}^{(i)2}(r)$ для состояний, определяемых квантовыми числами: $n_1 = 0, l_1 = 0, j_1 = 1/2$ (a), $n_2 = 2, l_2 = 0,$

$j_2 = 1/2$ (б), $n_1 = 0$, $l_1 = 1$, $j_1 = 1/2$ (в), $n_2 = 3$, $l_2 = 0$, $j_2 = 1/2$ (г). Кривые представлены в полулогарифмическом масштабе, это позволяет наглядно показать, что волновые функции $R_{nlj}^{(2)}$ локализованы в области $r < r_0(E)$, где $r_0(E)$ определяется выражением (5.71). Собственные значения для указанных состояний при $Z = 1$ близки к $E \approx m_0c^2$, поэтому величина r_0 в соответствии с формулой (5.71) близка к величине классического радиуса частицы.

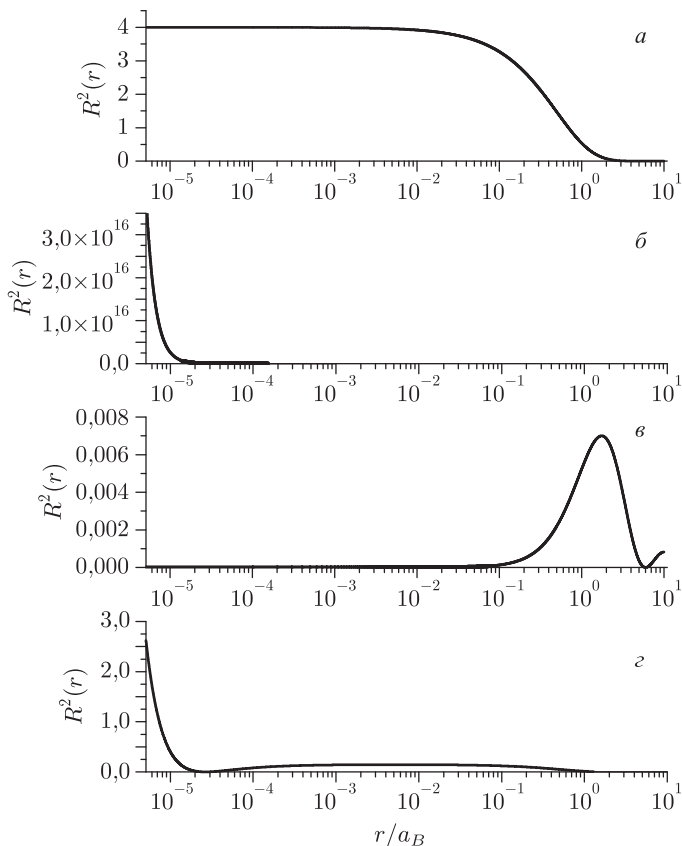


Рис. 12.5. Пространственный профиль радиальных волновых функций $R_{nlj}^{(i)2}(r)$ для состояний, определяемых квантовыми числами: $n_1 = 0$, $l_1 = 0$, $j_1 = 1/2$ (а), $n_2 = 2$, $l_2 = 1$, $j_2 = 1/2$ (б), $n_1 = 0$, $l_1 = 1$, $j_1 = 1/2$ (в), $n_2 = 3$, $l_2 = 1$, $j_2 = 1/2$ (г)

Подзона состояний отрицательно частотной зоны с отрицательными собственными значениями зеркально симметрична относительно состояний стандартного базиса. Квантовые числа этой подзоны состояний удовлетворяют условию $l_2 > n_2$. Взаимное расположение

ряда состояний этой подзоны схематически изображено на рис. 12.6. Предельное собственное значение состояний указанной серии равно $E_{nlj}^{(2)} \Big|_{j \rightarrow \infty} = -m_0 c^2$.

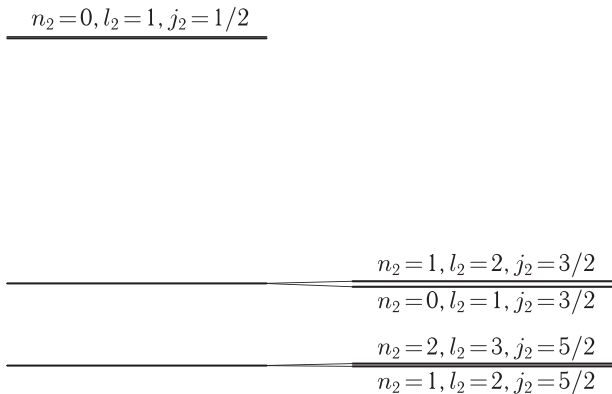


Рис. 12.6. Схематическая диаграмма ряда состояний (n_2, l_2, j_2) подзоны отрицательных собственных значений

12.5.3. Глубоколежащие состояния. Как мы уже отмечали выше, спектры собственных значений скалярных и спинорных частиц имеют сходную структуру. Различие состоит лишь в том, что у спинорной частицы появляется сверхтонкая структура, т.е. уровни, отвечающие одному и тому же значению j и различным значениям l , имеют различные собственные значения.

Так же как и в случае скалярной частицы, особый интерес представляет группа состояний с $n_2 = l_2$, поскольку собственные значения этой группы существенно меньше массы покоя частицы. Действительно, при $Z\alpha \ll 1$ из (12.97) получаем

$$\begin{aligned} \frac{E(n_2, l_2 = n_2, j_2 = l_2 + 1/2)}{m_0 c^2} &= \frac{2n_2 + 2 - \gamma_e^2}{2(n_2 + 1)(2n_2 + 1)} Z\alpha + \\ &+ \frac{8(n_2 + 1)^3 - 4(n_2 + 1)^2 \gamma_e^2 - 2(2 + n_2(5 + 4n_2) \gamma_e^4 + \gamma_e^6)}{16(n_2 + 1)^3 (2n_2 + 1)^3} (Z\alpha)^3 + \dots, \end{aligned} \tag{12.107}$$

$$\begin{aligned} \frac{E(n_2, l_2 = n_2, j_2 = l_2 - 1/2)}{m_0 c^2} &= \frac{2n_2 + \gamma_e^2}{2n_2(2n_2 + 1)} Z\alpha + \\ &+ \frac{8n_2^3 + 4n_2^2 \gamma_e^2 + 2(1 + n_2(3 + 4n_2) \gamma_e^4 - \gamma_e^6)}{16n_2^3 (2n_2 + 1)^3} (Z\alpha)^3 + \dots \end{aligned} \tag{12.108}$$

В частности, для состояний $(n_2 = 0, l_2 = 0, j_2 = 1/2)$ и $(n_2 = 1, l_2 = 1, j_2 = 1/2)$ получаем

$$E(n_2 = 0, l_2 = 0, j_2 = 1/2) = m_0c^2 \left[\left(1 - \frac{\gamma_e^2}{2}\right) Z\alpha + \frac{1}{16} (8 - 4\gamma_e^2 - 4\gamma_e^4 + \gamma_e^6) Z^3\alpha^3 + \dots \right], \quad (12.109)$$

$$E(n_2 = 1, l_2 = 1, j_2 = 1/2) = m_0c^2 \left[\frac{1}{3} \left(1 + \frac{\gamma_e^2}{2}\right) Z\alpha + \frac{1}{432} (8 + 4\gamma_e^2 + 16\gamma_e^4 - \gamma_e^6) Z^3\alpha^3 + \dots \right]. \quad (12.110)$$

Несложно видеть, что в первом приближении по малому параметру $Z\alpha$ энергия этих состояний равна

$$E_0 \approx m_0c^2 \frac{Z\alpha}{2}.$$

Таким образом, энергия связанного состояния E_0 в случае позитронииума составляет $\approx m_0c^2\alpha/4$, т. е. приблизительно в 600 раз меньше массы электрона.

Схематическая диаграмма собственных значений для ряда состояний этой группы представлена на рис. 12.7. Как видно, зеркальная симметрия проявляется в том, что с ростом полного углового момента собственные значения уменьшаются, а не растут как в состояниях стандартного базиса.

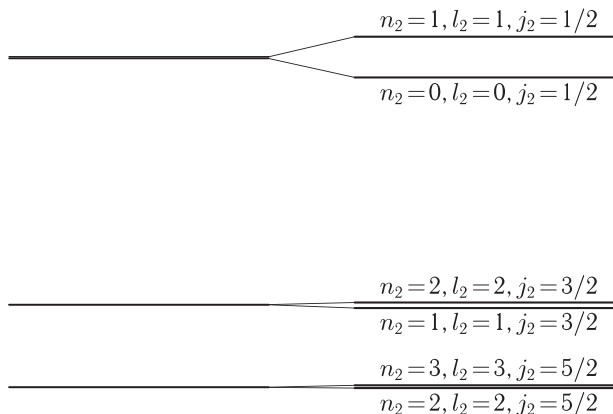


Рис. 12.7. Схематическая диаграмма ряда глубоколежащих состояний (n_2, l_2, j_2)

12.6. Непрерывный спектр положительных и отрицательных значений энергии

Решения для сплошного спектра состояний в кулоновском поле $E > m_0 c^2$ следуют из (12.70) при замене $\kappa \rightarrow -ik$, где

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}. \quad (12.111)$$

Радиальные волновые функции (12.72) и (12.95) принимают в результате указанной замены следующий вид:

$$R_{Ejl}^{(i)}(r) = C \exp(ikr)(kr)^{\nu_i-1} F\left(\nu_i - i\frac{EZ\alpha}{\hbar ck}, 2\nu_i, -i2kr\right), \quad (12.112)$$

где $\nu_1 = s + 1$ и $\nu_2 = -s$.

Асимптотика функции (12.112) при $r \rightarrow \infty$ имеет вид

$$R_{Ejl}^{(i)}(\xi, \nu, r) = C \exp\left(-\frac{\pi\eta}{2}\right) \frac{\Gamma(2\nu_i)}{|\Gamma(\nu_i + i\eta)|} \times \\ \times \frac{1}{2kr} \sin\left(kr + \eta \ln 2kr - \frac{\pi\nu_i}{2} - \arg \Gamma(\nu_i + i\eta)\right),$$

где

$$\eta = \frac{EZ\alpha}{\hbar ck}.$$

Учитывая, что радиальная волновая функция (12.112) с точностью до обозначений совпадает с радиальной волновой функцией для задачи о движении скалярной частицы в кулоновском поле, можно не останавливаться подробно на расчете константы нормировки волновой функции (12.112) и воспользоваться результатами раздела 5.4:

$$C = \sqrt{\frac{2m_0 c^2}{\pi E_k}} \frac{2k |\Gamma(\nu_i + i\eta)|}{\Gamma(2\nu_i)} \exp\left(\frac{\pi\eta}{2}\right).$$

Решение, отвечающие сплошному спектру отрицательной энергии $E < 0$, имеет вид

$$R_{Ejl}^{(i)}(\xi, \nu, r) = C \exp(-ikr)(2kr)^{\nu_i-1} F(\nu_i - i\eta, 2\nu_i, i2kr),$$

где

$$\eta = \frac{|E|Z\alpha}{\hbar ck}.$$

Асимптотический вид волновой функции и константа нормировки следуют из вышеприведенных формул при замене $\eta \rightarrow -\eta$.

Поскольку непрерывный спектр собственных значений является бесконечно вырожденным по величине полного и орбитального угловых моментов, то, как следует из (12.77)–(12.80), состояния сплошного спектра содержат безмассовые сферические квартионы.

12.7. Строение атома и атомные процессы в релятивистски инвариантной теории спинорного материального поля

Проведенный математический анализ задачи о движении частицы в кулоновском поле показал, что, так же как и в случае скалярных полей, возникают кардинальные отличия спектра состояний спинорного материального поля, предсказываемого решением волнового уравнения (7.2), от спектра состояний, следующего из решения уравнений, линейных по оператору $i\hbar \partial/\partial t$. Кардинальные различия состоят в том, что связанными могут быть состояния не только положительно, но и отрицательно частотной зон, которые, как показал анализ одномерных задач рассеяния, можно связать с состояниями частицы и зеркальной частицы соответственно.

12.7.1. Отрицательный полный угловой момент (зеркальная симметрия). Учитывая результаты анализа, проведенного в разделе 5.6, несложно догадаться, что зеркальная симметрия спектров (12.83) и (12.97), наличие которой мы проиллюстрировали выше для случая $Z\alpha \ll 1$, является следствием общих свойств симметрии уравнения (7.2) по отношению к CPT -преобразованиям.

Это можно легко показать, обобщая результаты анализа, представленного в разделе 5.6. Запишем выражения для параметров s_{\pm} , определяемых выражением (12.74), в следующем более громоздком, но тождественном виде:

$$s_{\pm}(j) = \left(j + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \times \\ \times \sqrt{1 + \left(j + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right)^{-2} \left(\pm \frac{Z_1^2 \alpha^2}{\sqrt{(j+1/2)^2 - Z_1^2 \alpha^2} + j + 1/2} - Z^2 \alpha^2\right)} - \frac{1}{2}.$$

Из последнего выражения вытекает, что имеют место следующие соотношения:

$$s_+(j_2 = -j_1 - 1) = -s_-(j_1) - 1, \quad s_-(j_2 = -j_1 - 1) = -s_+(j_1) - 1.$$

Подставляя последние соотношения в (12.97) и (12.100) и учитывая формулы (12.76) и (12.85), получаем

$$\begin{aligned} E_{n j_2}^{(l_2=j_2 \mp 1/2)} \Big|_{j_2=-j_1-1} &= E_{n j_1}^{(l_1=j_1 \pm 1/2)}, \\ R_{n, j_2, l_2=j_2-1/2}^{(2)}(r) \Big|_{j_2=-j_1-1} &= R_{n, j_1, l_1=j_1+1/2}^{(1)}(r), \\ R_{n, j_2, l_2=j_2+1/2}^{(2)}(r) \Big|_{j_2=-j_1-1} &= R_{n, j_1, l_1=j_1-1/2}^{(1)}(r). \end{aligned}$$

Далее, используя определение (12.44) спиноров $\Omega_{j l m}^{(1,2)}$, получаем

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{c} \Omega_{j_2, l_2=j_2-1/2, m}^{(1)}(\pi - \theta, \varphi) \\ -\zeta \Omega_{j_2, l_2=j_2+1/2, m}^{(2)}(\pi - \theta, \varphi) \end{array} \right) \Big|_{j_2=-j_1-1} &= \\ &= (-1)^{m+1/2} \left(\begin{array}{c} \Omega_{j_1, l_1=j_1+1/2, m}^{(2)}(\theta, \varphi) \\ -\zeta \Omega_{j_1, l_1=j_1-1/2, m}^{(1)}(\theta, \varphi) \end{array} \right), \\ \left(\begin{array}{c} \Omega_{j_2, l_2=j_2+1/2, m}^{(2)}(\pi - \theta, \varphi) \\ -\zeta \Omega_{j_2, l_2=j_2-1/2, m}^{(1)}(\pi - \theta, \varphi) \end{array} \right) \Big|_{j_2=-j_1-1} &= \\ &= (-1)^{m+1/2} \left(\begin{array}{c} \Omega_{j_1, l_1=j_1-1/2, m}^{(1)}(\theta, \varphi) \\ -\zeta \Omega_{j_1, l_1=j_1+1/2, m}^{(2)}(\theta, \varphi) \end{array} \right). \end{aligned}$$

Следовательно, учитывая определения (12.82) и (12.98), получаем

$$\Psi_{n, j_2, m}^{(l_2=j_2-1/2)}(r, \pi - \theta, \varphi, t) \Big|_{j_2=-j_1-1} = (-1)^{m+1/2} \Psi_{n, j_1, m}^{(l_1=j_1+1/2)}(r, \theta, \varphi, t), \quad (12.113a)$$

$$\Psi_{n, j_2, m}^{(l_2=j_2+1/2)}(r, \pi - \theta, \varphi, t) \Big|_{j_2=-j_1-1} = (-1)^{m+1/2} \Psi_{n, j_1, m}^{(l_1=j_1-1/2)}(r, \theta, \varphi, t). \quad (12.113b)$$

Как видно, получившиеся соотношения, связывающие волновые функции частиц и зеркальных частиц, обобщают соотношения (5.88) на случай спинорного поля. Спинорное материальное поле, в отличие от изотропного скалярного поля, содержит выделенное направление, поэтому связанными оказываются не пространственно инвертированные, а зеркально отраженные волновые функции частицы и зеркальной частицы.

Учитывая результаты анализа, проведенного в разделе 5.6.1, несложно догадаться, что преобразования (12.113a, б) определяют преобразования *зеркальной* симметрии и, так же как и в случае скалярных полей, не сводятся к комбинации преобразований *CPT*-симметрии. Действительно, рассмотрим преобразования пространственной инверсии и обращения времени для волновой функции частицы, взаимодействующей с кулоновским полем. Ограничимся

рассмотрением лишь одного из состояний, например $\Psi_{njlm}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$, поскольку приведенные ниже формулы легко обобщаются и на все оставшиеся состояния. Итак,

$$\begin{aligned}
 P_1: & \gamma_4 \Psi_{njlm}^{(1)}(-\mathbf{r}, t) = (-1)^l \Psi_{njlm}^{(1)}(\mathbf{r}, t), \\
 T_1: & \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \Psi_{n,j,l=j-1/2,m}^{(1)}(\mathbf{r}, -t) \Big|_{Z>0} = \\
 & = \gamma_4 \Psi_{n,j,l=j+1/2,m}^{(3)}(\mathbf{r}, t) \Big|_{Z<0}, \\
 P_2: & \gamma_4 \gamma_2 \Psi_{n,j,l=j-1/2,m}^{(1)*}(-\mathbf{r}, t) \Big|_{Z>0} = \\
 & = (-1)^{m-1/2} \gamma_4 \Psi_{n,j,l=j+1/2,-m}^{(3)}(\mathbf{r}, t) \Big|_{Z<0}, \\
 T_2: & \gamma_3 \gamma_1 \Psi_{n,j,l=j-1/2,m}^{(1)*}(\mathbf{r}, -t) = \\
 & = (-1)^{l-m+1/2} \gamma_4 \Psi_{n,j,l=j-1/2,-m}^{(1)}(\mathbf{r}, t), \\
 C_1: & \gamma_2 \Psi_{n,j,l=j-1/2,m}^{(1)*}(\mathbf{r}, t) \Big|_{Z>0} = \\
 & = (-1)^{l-m-1/2} \gamma_4 \Psi_{n,j,l=j+1/2,-m}^{(3)}(\mathbf{r}, t) \Big|_{Z<0}, \\
 C_2: & \gamma_4 \gamma_3 \gamma_1 \Psi_{n,j,l=j-1/2,m}^{(1)*}(\mathbf{r}, t) = \\
 & = (-1)^{l-m-1/2} \gamma_4 \Psi_{n,j,l=j-1/2,-m}^{(1)}(\mathbf{r}, -t).
 \end{aligned} \tag{12.114}$$

Так же как и в случае скалярных полей, мы ввели обозначение $Z > 0$ для волновых функций задачи о движении частицы в притягивающем кулоновском поле и $Z < 0$ — для волновых функций задачи о движении частицы в отталкивающем кулоновском поле. Следует, однако, отметить, что в случае отталкивающего кулоновского поля уравнение (7.2) принимает вид

$$\left[\Delta - \frac{m_0^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} - \frac{2EZ\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} \right] \Psi = i \frac{\mu_0}{\mu_B} \frac{Z\alpha}{r^2} \alpha_r \Psi. \tag{12.115}$$

Сравнивая это уравнение с уравнением (12.66), несложно видеть, что спектр связанных состояний указанной задачи отличается по знаку от спектров (12.76) и (12.97). Однако одновременно с указанным изменением временных частей волновых функций происходит и изменение пространственных частей волновых функций, сводящееся к замене $\zeta \rightarrow -\zeta$. Таким образом, в решении задачи о движении частицы в отталкивающем кулоновском поле появляются новые биспиноры, отличные от биспиноров (12.84), входящих в волновые функции (12.77) и (12.80). Например,

$$\Psi_{jm}^{(l=j-1/2)}(\theta, \varphi) \Big|_{Z<0} = \frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} \\ \zeta \Omega_{jl+1m}^{(2)} \end{pmatrix} = \gamma_4 \Psi_{jm}^{(l=j-1/2)}(\theta, \varphi) \Big|_{Z>0}. \tag{12.116}$$

Как следует из (12.114), анализ *CPT*-преобразований волновых функций частицы, взаимодействующей с кулоновским полем, с неизбежностью должен учитывать свойство биспиноров, определяющееся соотношением (12.116).

Итак, проведенный анализ показал, что волновые уравнения со второй производной по времени проявляют новый тип симметрии — зеркальную симметрию. Эта симметрия проявляется в наличии связи волновых функций, описывающих состояния частиц и зеркальных частиц, и присуща как скалярным, так и спинорным полям. Преобразование зеркальной симметрии не сводится к комбинации преобразований подгруппы *CPT*-симметрии. В случае скалярных полей указанную симметрию можно понимать в расширенном смысле, как связь волновых функций $\psi^{(2)}(-\mathbf{r}, t)$ и $\psi^{(1)}(\mathbf{r}, t)$, определяемую соотношением (5.95), однако, учитывая (12.113а, б), ее можно записать в виде

$$\psi_{nl_2m}^{(2)}(r, \pi - \theta, \varphi, t) \Big|_{l_2=-(l_1+1)} = (-1)^m \psi_{nl_1m}^{(1)}(r, \pi - \theta, \varphi, t),$$

что подчеркивает общность указанного преобразования для скалярных и спинорных полей.

12.7.2. Киральные состояния частиц. В предыдущих главах мы уже говорили, что удвоение пространства состояний материальных полей, описываемых волновыми уравнениями со второй производной по времени, приводит к удвоению числа преобразований *CPT*-симметрии. В гл. 5 мы отмечали, что ввиду квадратичной зависимости краевой задачи (5.51) от собственных значений E_n общее решение (5.54) является одновременно решением задач о движении частицы как в притягивающем, так и в отталкивающем потенциалах. Отличие состоит лишь в знаке собственных значений, который определяется условием выполнения соотношений (5.56а, б). Поэтому, наряду с традиционными P_1 - и T_2 -преобразованиями, отражающими свойства симметрии волновых функций каждой из указанных задач, появляются дополнительные P_2 - и T_1 -преобразования, отражающие свойства симметрии волновых функций двух различных физических задач, а именно задач о движении частицы в притягивающем и отталкивающем кулоновском поле.

Собственные значения краевых задач о движении спинорной частицы в притягивающем и отталкивающем кулоновском поле связаны теми же соотношениями, что и в случае скалярной частицы. Однако волновые функции указанных двух задач оказываются различными. В случае движения частицы в притягивающем поле собственные волновые функции выражаются через биспиноры ψ_p и ψ_a , имеющие следующий вид:

$$\psi_p = \begin{pmatrix} \Omega_1 \\ -\zeta\Omega_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_a = \begin{pmatrix} -\zeta\Omega_2 \\ \Omega_1 \end{pmatrix}.$$

Указанные биспиноры связаны соотношением

$$\psi_a = -\gamma_5 \psi_p$$

и согласно принятой выше терминологии описывают состояния частицы и античастицы. Вместе с тем, как следует из результатов общей теории, изложенной в гл. 7, 8, произвольное состояние спинорного материального поля определяется разложением по четырем ортогональным биспинорам. Следовательно, понятий *частица* и *античастица* недостаточно для описания произвольного состояния спинорного поля. Неудивительно поэтому, что решения задачи о движении частицы в отталкивающем кулоновском поле выражаются через биспиноры

$$\psi_c = \begin{pmatrix} \Omega_1 \\ \zeta \Omega_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_{ac} = \begin{pmatrix} \zeta \Omega_2 \\ \Omega_1 \end{pmatrix}, \quad (12.117)$$

которые также связаны соотношением

$$\psi_{ac} = -\gamma_5 \psi_c.$$

Состояние, описываемое биспинором ψ_c , можно назвать состоянием киральной частицы, а состояние ψ_{ac} — состоянием киральной античастицы. Основанием к использованию указанной терминологии служит следующее обстоятельство. Как мы показали в гл. 7, частица и античастица характеризуются следующими значениями билинейных комбинаций, определяющих состояние спинорного поля:

$$\begin{aligned} N_a(\mathbf{r}, t) &= -N_p(\mathbf{r}, t), & \mathbf{P}_a(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{P}_p(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{M}_a(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{M}_p(\mathbf{r}, t), & \Gamma_a(\mathbf{r}, t) &= -\Gamma_p(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Для частицы, находящейся в состоянии, описываемом биспинором ψ_c , получаем

$$\begin{aligned} N_c(\mathbf{r}, t) &= N_p(\mathbf{r}, t), & \mathbf{P}_c(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{P}_p(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{M}_c(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{M}_p(\mathbf{r}, t), & \Gamma_c(\mathbf{r}, t) &= -\Gamma_p(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (12.118)$$

Как видно,

$$[\mathbf{P}_a \mathbf{M}_a] = [\mathbf{P}_p \mathbf{M}_p],$$

т.е. состояния частицы и античастицы характеризуются одинаковой киральностью. В свою очередь для состояний частицы и киральной частицы получаем

$$[\mathbf{P}_c \mathbf{M}_c] = -[\mathbf{P}_p \mathbf{M}_p],$$

т.е. состояния частиц спинорного материального поля, описываемых волновыми функциями ψ_p и ψ_c , характеризуются противоположными значениями киральности.

В гл. 9, проводя анализ рассеяния частицы в одномерном пространственно неоднородном внешнем поле, мы показали, что в качестве естественных релятивистски инвариантных характеристик состояния спинорной частицы выступают 4-векторы $P_\mu^{(p)} = (\mathbf{P}_p, N_p)$

и $M_\mu^{(p)} = (\mathbf{M}_p, \Gamma_p)$. Несложно видеть, что в кулоновском поле имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} P_\mu^{(p)} P_\mu^{(p)} &= P_\mu^{(a)} P_\mu^{(a)} = P_\mu^{(c)} P_\mu^{(c)}, \\ M_\mu^{(p)} M_\mu^{(p)} &= M_\mu^{(a)} M_\mu^{(a)} = M_\mu^{(c)} M_\mu^{(c)}, \\ P_\mu^{(p)} M_\mu^{(p)} &= P_\mu^{(a)} M_\mu^{(a)} = -P_\mu^{(c)} M_\mu^{(c)}. \end{aligned}$$

Полученные выше соотношения наглядно демонстрируют различие свойств частиц, античастиц, киральных частиц и киральных античастиц.

12.7.3. Процессы в атомах, происходящие с изменением и без изменения состояния атомного ядра. Как следует из результатов приведенного выше анализа, различия между волновыми функциями связанных состояний частиц и зеркальных частиц спинорного материального поля качественно совпадают с аналогичными различиями волновых функций частиц и зеркальных частиц скалярного материального поля. Волновые функции связанных состояний зеркальных частиц сингулярны в нуле и поэтому определяют состояние ядра атома, а не его атомных оболочек. Состояние атомных оболочек определяется числами заполнения состояний стандартного спектра состояний. Переходы частиц между состояниями положительно и отрицательно частотных зон приводят к процессам, в которых изменяется состояние как атомной оболочки атома, так и его ядра. Мы не будем останавливаться здесь на обсуждении указанных процессов, поскольку их общая характеристика была приведена во введении к гл. 6.

Обсудим здесь лишь ряд специфических особенностей спектра (12.97). Выше мы уже отмечали, что наибольшей спецификой отличаются глубоколежащие состояния. Например, глубоколежащее состояние атома позитронииума отвечает нейтральной частице с массой, на три порядка меньшей массы электрона. Однако более интригующим является следующее обстоятельство. Спектр (12.97) является спектром собственных значений спинорной частицы конечной массы, взаимодействующей с кулоновским полем скалярной частицы бесконечной массы. Как мы увидим позже, этот спектр отличается от спектра собственных значений скалярной частицы, взаимодействующей с кулоновским полем спинорной частицы. Тем не менее, полагая, что в нулевом приближении эти спектры близки, для энергии связанного состояния протона ($m_p c^2 = 938,3$ МэВ) и π^- -мезона ($m_\pi c^2 = 139,6$ МэВ), находящегося в основном состоянии подзоны глубоколежащих состояний (т.е. $|E_{njl}^{(2)}| \ll m_0 c^2$), получаем

$$E_\pi (n_2 = 1, j_2 = 1/2, l_2 = 1) \approx \frac{m_r c^2 \alpha}{3} \left(1 + \frac{\gamma_p^2}{2} \right) \approx 1,4 \text{ МэВ},$$

где мы положили $\mu_p = 2,793\mu_N$ (μ_N — ядерный магнетон) и

$$m_r = \frac{m_\pi m_p}{m_\pi + m_p}.$$

Связанное состояние протона и π^- -мезона, находящегося в указанном состоянии, образует составную нейтральную частицу. Как видно, масса покоя указанной составной частицы близка к массе покоя нейтрона m_n . Действительно, $m_n c^2 = m_p c^2 + 1,3$ МэВ. С учетом грубости приведенных оценок полученное совпадение вызывает пристальный интерес. Действительно, масса нейтрона как связанного состояния π^- -мезона и протона, превышает сумму масс покоя протона и электрона, поэтому вполне естественным выглядит распад нейтрона на протон и электрон. Этот распад оставляет неизменными трансформационные свойства материального поля, поскольку связанное состояние скалярного π^- -мезона и спинорного протона эквивалентно спинорному полю. В свою очередь протон и электрон, возникающие в результате указанного распада, могут иметь противоположно направленные спины, образуя суперпозиционное состояние со спином нуль, эквивалентное скалярному полю. С тем чтобы общая волновая функция материального поля осталась спинорной, в процессе указанного распада должен также рождаться безмассовый квартион. Как мы отмечали в разделе 12.6, непрерывный спектр состояний в кулоновском поле содержит состояния безмассовых сферических квартионов.

Указанная интерпретация может быть перенесена и на другие связанные состояния нуклонов. Например, дейтрон является связанным глубоколежащим состоянием π^- -мезона в поле двух протонов и т. д. Поскольку энергия глубоколежащего состояния пропорциональна $m_\pi c^2 Z\alpha$, то приближительное удвоение энергии связи дейтрона, по сравнению с энергией связи нейтрона, является в рамках такой модели вполне предсказуемым.

Радиальные волновые функции связанных состояний зеркальных скалярных и спинорных частиц в кулоновском поле весьма близки и отличаются лишь значением параметра s . Мы не будем приводить здесь иллюстраций пространственного распределения волновых функций, поскольку они качественно совпадают с теми, что приведены в гл. 5.

Волновые функции состояний отрицательно частотной зоны являются сингулярными в нуле и распределены в пределах области, имеющей размер порядка половины величины классического радиуса частицы. Однако среди этих состояний выделяются состояния, отвечающие $l_2 = 0$, поскольку волновые функции этих состояний при $Z\alpha \ll 1$ имеют вид

$$R_{n,l=0,j=1/2}^{(2)}(r) = CL_n^{(-2s-1)}(2\kappa_n r) \exp(-\kappa_n r) (2\kappa_n r)^{-1+Z^2\alpha^2/2}.$$

Как видно, для таких состояний

$$R^2(r)r^2 = C^2 L_n^{(-2s-1)^2}(2\kappa_n r) \exp(-2\kappa_n r) (2\kappa_n r)^{Z^2\alpha^2},$$

т. е. радиальное распределение $R^2(r)r^2$ остается конечным в нуле. При этом для состояний с $n > 0$ при $Z\alpha \ll 1$ радиус экспоненциального спада волновой функции определяется выражением

$$a_n = \kappa_n^{-1} = \frac{a_B n}{Z},$$

т. е. совпадает с радиусом экспоненциального спада волновых функций стандартного базиса состояний. Это обусловлено тем, что собственные значения состояний с $l = 0$ и $n > 0$ лежат в пределах области собственных значений состояний стандартного базиса $m_0 c^2 - I_0 \leq E_n \leq m_0 c^2$, где I_0 — потенциал ионизации, определяемый выражением (12.86).

Однако для глубоколежащих состояний с собственными значениями $E_n \ll m_0 c^2$, как следует из (12.107)–(12.108), радиус экспоненциального спада волновой функции определяется выражением

$$a_0 = \kappa_{0s}^{-1} = \frac{\hbar}{m_0 c} = a_B \alpha = \lambda_C. \quad (12.119)$$

Таким образом, для состояния ($n_2 = 0$, $l_2 = 0$, $j_2 = 1/2$) радиус пространственного распределения функции $R^2(r)r^2$ равен комптоновской длине волны частицы. Например, в случае электрона эта величина в α^{-1} раз меньше величины боровского радиуса, т. е. характерной величины радиуса пространственного распределения волновых функций состояний стандартного базиса.

Отметим, что приведенные значения энергии и радиуса оболочек глубоколежащих состояний неоспоримо указывают на то, что эти состояния не могут быть рассчитаны методами теории возмущений, поэтому в рамках традиционных теорий эти состояния связываются с состояниями «новых» частиц. Как следует из приведенных выше оценок, глубоколежащие связанные состояния π^- -мезонов и протонов образуют состояния, отвечающие ядрам атомов.

12.7.4. Электронно-ядерные 0-0 переходы. Так же как и в случае скалярных полей (мы говорили об этом в разделе 5.6.3), собственные значения зоны положительно и отрицательно частотных состояний определяются решением различных краевых задач, которые отличаются видом асимптотического поведения волновых функций при $r \rightarrow 0$:

$$R_{nlj}^{(1)}(r) \Big|_{r \rightarrow 0} = C_1 r^{s_{\pm}}, \quad R_{nlj}^{(2)}(r) \Big|_{r \rightarrow 0} = C_2 r^{-(s_{\pm}+1)}.$$

Собственные функции каждой из краевых задач составляют ортогональный базис функций:

$$\begin{aligned} \Psi_{nljm}^{(1)}(\mathbf{r}) &= \Psi_{jm}^{(l)}(\theta, \varphi) R_{nlj}^{(1)}(r), \\ \Psi_{nljm}^{(2)}(\mathbf{r}) &= \Psi_{jm}^{(l)}(\theta, \varphi) R_{nlj}^{(2)}(r), \end{aligned}$$

где $\Psi_{jm}^{(l)}(\theta, \varphi)$ — ортонормированные биспиноры (12.84). Однако собственные волновые функции различных базисов в общем случае орто-

гональными друг другу не являются. Следовательно, каждую из собственных волновых функций одного из базисов мы можем разложить в ряд по собственным функциям второго базиса собственных функций. Учитывая правила ортогональности биспиноров $\Psi_{jm}^{(l)}(\theta, \varphi)$, разложение волновой функции базиса отрицательно частотных решений по базису волновых функций положительно частотной зоны будет иметь, например, вид

$$R_{nlj}^{(2)}(r) = \sum_{n'} C_{nn'}^{(lj)} R_{n'lj}^{(1)}(r),$$

где коэффициенты разложения $C_{nn'}$ определяются из условий ортогональности волновых функций каждого базиса и имеют вид

$$C_{nn'}^{(lj)} = \frac{1}{m_0 c^2} \int_0^\infty R_{nlj}^{(1)}(r) \left(\frac{E_{nlj}^{(1)} + E_{n'lj}^{(2)}}{2} - U(r) \right) R_{n'lj}^{(2)}(r) r^2 dr. \quad (12.120)$$

Поскольку угловые части волновых функций обоих базисов совпадают, то правила отбора для переходов между состояниями различных базисов совпадают с правилами отбора для переходов между состояниями стандартного базиса. Однако поскольку волновые функции $R_{nlj}^{(2)}(r)$ являются сингулярными в нуле, межзонные переходы описывают широкий круг явлений в атомах, который связан с одновременным изменением как состояния электронов атомной оболочки, так и состояния ядра атома. Аналогичные процессы, протекающие в мезоатомах, мы обсуждали в гл. 6.

Специфика правил отбора для переходов между состояниями различных базисов состоит в том, что становятся возможными переходы между состояниями с равными нулю значениями углового момента одного и другого базисов. Эту специфику межзонных переходов в атомах мы также обсуждали в гл. 5, 6.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СПИНОРНЫХ ЧАСТИЦ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Настоящая глава посвящена анализу задачи о взаимодействии атома с внешним электромагнитным полем. Традиционно в курсах квантовой механики и электродинамики ограничиваются рассмотрением задач о взаимодействии одиночных фотонов с атомами или заряженными частицами. Однако развитие лазерной физики делает более актуальным круг задач, связанных с изучением взаимодействия одиночного атома с сильными лазерными полями. Этот круг задач требует привлечения новых подходов к описанию атомно-полевых взаимодействий. И обусловлено это тем, что наличие сильного внешнего поля существенно изменяет симметричные свойства полной системы, состоящей из атома и внешнего поля. Действительно, электромагнитная волна имеет три выделенных направления в пространстве, связанные с векторами напряженности электрического и магнитного полей и волнового вектора, которые нарушают сферическую симметрию внутриатомного поля. С другой стороны, спонтанные переходы электронов из возбужденных состояний атома обусловлены взаимодействием с равновесным тепловым излучением, создаваемым окружающей средой. Поскольку равновесное излучение изотропно и неполяризовано, то система, состоящая из атома и равновесного поля, остается сферически симметричной. Следовательно, правила отбора для переходов электрона между различными состояниями атома будут отличаться в случае спонтанных переходов и переходов, стимулированных сильным лазерным полем. Указанные отличия будут наиболее существенны, когда напряженность поля лазерной волны будет порядка внутриатомной.

Учитывая вышесказанное, можно выделить три круга задач, для анализа которых можно использовать различные приближения общей теории взаимодействия электромагнитного излучения с атомом. Это задача о спонтанном распаде, когда атом взаимодействует с равновесным полем, число заполнения мод которого много меньше единицы, задача о взаимодействии атома с полями субатомной напряженности и задача о взаимодействии атома с полями околоатомной напряженности.

Все эти три круга задач будут последовательно рассмотрены в настоящей книге. Наряду с традиционной задачей о спонтанном распаде атома в свободном пространстве, мы обсудим также задачу о спонтанном распаде атома, находящегося в резонаторе. Как будет показано,

анализ этой задачи дает дополнительные возможности интерпретации механизма спонтанных переходов электрона в атоме.

13.1. Калибровочное преобразование потенциалов электромагнитного поля

В настоящем разделе мы обсудим ряд общих свойств уравнения (7.2) для частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем, которые связаны с инвариантностью уравнения (7.2) относительно калибровочного преобразования потенциалов электромагнитного поля. Удобство использования указанного преобразования состоит в том, что оно позволяет выделить в уравнении слагаемые, отвечающие различным типам симметрии взаимодействия.

13.1.1. Градиентное преобразование. Пусть частица взаимодействует со стационарным внутриатомным полем $A_\mu^{(0)} = (\mathbf{A}_0(\mathbf{r}), i\varphi_0(\mathbf{r}))$ и внешним электромагнитным полем $A_\mu^{(e)}(x) = (\mathbf{A}_e(x), i\varphi_e(x))$. Уравнение (7.2) имеет в этом случае вид

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \frac{i\mu_0}{2} F_{\mu\nu} \gamma_\nu \gamma_\mu \right] \Psi = 0, \quad (13.1)$$

где $A_\mu = A_\mu^{(0)} + A_\mu^{(e)}$.

При анализе задач взаимодействия частицы с внешними электромагнитными полями бывает удобно воспользоваться градиентным преобразованием. Как мы отмечали выше, уравнение (13.1) инвариантно относительно калибровочного преобразования потенциалов электромагнитного поля:

$$A'_\mu = A_\mu - \frac{\partial \chi}{\partial x_\mu},$$

оставляющего неизменными векторы напряженности электрического и магнитного полей, которые, в отличие от потенциалов поля, являются физически наблюдаемыми или измеримыми величинами:

$$\mathbf{E}' = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} - \nabla \varphi' = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi = \mathbf{E}, \quad \mathbf{B}' = \text{rot } \mathbf{A}' = \text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{B}.$$

Действительно, преобразование волновой функции уравнения (13.1),

$$\Psi'(x) = \Psi(x) \exp \left[-i \frac{q_0}{\hbar c} \chi(x) \right], \quad (13.2)$$

приводит уравнение (13.1) к виду

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A'_\mu \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \frac{i\mu_0}{2} F_{\mu\nu} \gamma_\nu \gamma_\mu \right] \Psi'(x) = 0. \quad (13.3)$$

Компоненты тензора электромагнитного поля являются наблюдаемыми величинами, поэтому $F'_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}$.

Возьмем функцию $\chi(x)$ градиентного преобразования в виде

$$\chi(x) = A_\mu(x)x_\mu. \quad (13.4)$$

Используя (13.4), для штрихованных потенциалов поля получаем

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \frac{\partial}{\partial x_\mu} (A_\nu(x)x_\nu) = -x_\nu \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu}. \quad (13.5)$$

Поскольку $F'_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}$, то изменяется только первое слагаемое уравнения (13.3):

$$\left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A'_\mu\right)^2 = p_\mu^2 + 2\frac{q_0}{c} \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} x_\nu p_\mu - i\hbar \frac{q_0}{c} x_\nu \frac{\partial^2 A_\nu}{\partial x_\mu^2} + \frac{q_0^2}{c^2} A_\mu'^2.$$

Второе слагаемое в правой части последнего равенства с помощью тождественных преобразований можно привести к следующему виду:

$$2\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} x_\nu p_\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \right) (x_\nu p_\mu - x_\mu p_\nu) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} + \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \right) (x_\nu p_\mu + x_\mu p_\nu). \quad (13.6)$$

Таким образом, рассматриваемое слагаемое представляет собой сумму произведений двух антисимметричных и двух симметричных тензоров второго ранга, один из которых относится к электромагнитному полю, а второй — к материальному. Эти тензоры отличаются по своим трансформационным свойствам относительно операции трех- и четырехмерных вращений. Антисимметричный тензор электромагнитного поля совпадает с $F_{\mu\nu}$, а антисимметричный материальный тензор выражается через антисимметричный 4-тензор трех- и четырехмерных вращений:

$$(x_\nu p_\mu - x_\mu p_\nu) = \hbar J_{\nu\mu}.$$

Подставляя (13.6) в (13.3), окончательно получаем

$$\left[\frac{1}{2m_0} (p_\mu^2 + m_0^2 c^2) + \frac{1}{2} F_{\mu\nu} (\mu_B J_{\nu\mu} + 2\mu_0 J_{\nu\mu}^{(\gamma)}) + \frac{q_0}{2m_0 c} \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} (x_\nu p_\mu + x_\mu p_\nu) - i\mu_B x_\nu \frac{\partial^2 A_\nu}{\partial x_\mu^2} + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \left(x_\nu \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} \right)^2 \right] \Psi = 0, \quad (13.7)$$

где $\mu_B = q_0 \hbar / 2m_0 c$ — магнетон Бора, а $J_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ — введенный в гл. 3 оператор преобразования формы биспинорной волновой функции при преобразованиях трех- и четырехмерных вращений, имеющий вид

$$J_{\mu\nu}^{(\gamma)} = -\frac{i}{4} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu).$$

Запишем уравнение (13.7) в следующем виде:

$$Z\Psi = (Z_0 + V)\Psi = 0,$$

где

$$Z_0 = \frac{1}{2m_0} (p_\mu^2 + m_0^2 c^2),$$

т. е. Z_0 является оператором уравнения для свободной частицы.

13.1.2. Векторы электрической и магнитной поляризаций.

Мы видим, что уравнение (13.7) содержит следующие слагаемые, описывающие взаимодействие частицы с электромагнитным полем. Первое слагаемое зависит от операторов трех- и четырехмерных вращений, следовательно, оно описывает взаимодействия, приводящие к вращательному или поступательному ускоренному движению частицы. Это слагаемое можно преобразовать к следующему виду:

$$V^{(1)} = \frac{1}{2} F_{\mu\nu} (\mu_B J_{\nu\mu} + 2\mu_0 J_{\nu\mu}^{(\gamma)}) = \mathbf{E} (\mu_B \mathbf{k} + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha}) - \mathbf{B} (\mu_B \mathbf{l} + \mu_0 \boldsymbol{\Sigma}), \quad (13.8)$$

где \mathbf{k} — генератор преобразования четырехмерных вращений, т. е. преобразований Лоренца, а \mathbf{l} — оператор углового момента. В предыдущих главах мы уже показывали, что квантово-механическое среднее оператора \mathbf{k} связано с оператором дипольного момента частицы. Учитывая, что вектор электрической поляризации, связанный с внутренними степенями свободы частицы, имеет вид: $\mathbf{P} = -i\mu_0 \bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi$, несложно видеть, что первое слагаемое в правой части уравнения (13.8) является произведением вектора напряженности электрического поля и оператора электрической поляризации $\boldsymbol{\pi} = -(\mu_B \mathbf{k} + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha})$ материального спинорного поля. Физический смысл второго слагаемого в правой части (13.8) более очевиден — это произведение вектора напряженности магнитного поля и операторов орбитального и спинового магнитных моментов частицы.

В предыдущих главах мы видели, что при движении частицы в однородном магнитном поле сохраняющейся величиной является проекция полного углового момента на направление поля:

$$j_B = \mathbf{e}_B \left(\mathbf{l} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} \right),$$

где $\mathbf{e}_B = \mathbf{B}_0/B_0$. Действительно, как несложно видеть, j_B коммутирует с оператором

$$Z = Z_0 + V^{(1)} = \frac{1}{2m_0} (p_\mu^2 + m_0^2 c^2) - \mathbf{B}_0 (\mu_B \mathbf{l} + \mu_0 \boldsymbol{\Sigma}). \quad (13.9)$$

Аналогично этому, проекция оператора

$$\mathbf{D} = -\mathbf{k} - \frac{i}{2} \boldsymbol{\alpha} \quad (13.10)$$

на направление постоянного электрического поля

$$D_E = \mathbf{e}_E \mathbf{D}$$

коммутирует с оператором

$$Z = Z_0 + V^{(1)} = \frac{1}{2m_0} (p_\mu^2 + m_0^2 c^2) + \mathbf{E}_0 (\mu_B \mathbf{k} + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha}). \quad (13.11)$$

Действительно, в гл. 3 мы показали, что оператор \mathbf{k} коммутирует с p_μ^2 . Несмотря на указанную аналогию, существует, однако, значительное различие между оператором полного углового момента \mathbf{j} и оператором \mathbf{D} . Дело в том, что оператор \mathbf{j} коммутирует как с оператором (13.9), так и с полным оператором уравнения (13.7), соответствующим задаче о движении частицы в однородном магнитном поле. С другой стороны, оператор \mathbf{D} коммутирует лишь с приближенным оператором (13.11) и не коммутирует с полным оператором уравнения (13.7), отвечающим задаче о движении частицы в однородном электрическом поле. Связано это с тем, что оператор \mathbf{I}^2 является инвариантным относительно трехмерных вращений, а оператор \mathbf{k}^2 неинвариантен относительно четырехмерных вращений. Как мы отмечали в гл. 3, два последовательных трехмерных вращения всегда эквивалентны трехмерному вращению. В то время как два последовательных четырехмерных вращения, совершенные в разных плоскостях, выводят ось вращения в гиперплоскость $t = \text{const}$.

В общем случае с учетом трех последних слагаемых уравнения (13.7)

$$V^{(2)} = \frac{q_0}{2m_0 c} \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} (x_\nu p_\mu + x_\mu p_\nu) - i\mu_B x_\nu \frac{\partial^2 A_\nu}{\partial x_\mu^2} + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \left(x_\nu \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} \right)^2 \quad (13.12)$$

ни проекция полного углового момента, ни проекция оператора (13.10) не являются сохраняющимися величинами, поскольку ни одна из компонент симметричного тензора $(x_\nu p_\mu + x_\mu p_\nu)$ не инвариантна относительно трех- или четырехмерных вращений. В случае взаимодействия частицы с полем электромагнитной волны первое слагаемое в (13.12) осциллирует на частоте внешнего поля. Второе слагаемое в (13.12) зависит лишь от потенциалов внутриатомного поля, поскольку для свободного электромагнитного поля $\partial^2 A_\nu^{(e)} / \partial x_\mu^2 = 0$, поэтому если градиентному преобразованию подвергать только потенциалы внешнего электромагнитного поля, т. е. в (13.4) положить $A_\mu = A_\mu^{(e)}$, то это слагаемое обращается в нуль. Третье слагаемое в (13.12) содержит неосциллирующую компоненту (пондеромоторный сдвиг) и компоненту, осциллирующую на частоте второй гармоники внешнего поля.

13.1.3. Градиентное преобразование потенциалов свободного электромагнитного поля. Отметим, что штрихованный векторный потенциал (13.5) с учетом условия лоренцевской калибровки может быть записан в следующем виде:

$$A'_\mu(x) = \left(x_\mu \frac{\partial}{\partial x_\nu} - x_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right) A_\nu = iJ_{\mu\nu} A_\nu, \quad (13.13)$$

следовательно, пространственные и временные компоненты потенциалов электромагнитного поля могут быть представлены следующим образом:

$$\mathbf{A}' = -i[\mathbf{1A}] + \mathbf{k}A_4, \quad A'_4 = -\mathbf{kA}. \quad (13.14)$$

Последние равенства можно переписать в виде

$$\mathbf{A}' = -i[\mathbf{1A}] + ct \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{r}}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad \varphi' = \frac{\mathbf{r}}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - t \frac{\partial \varphi}{\partial t}.$$

В частном случае поперечного электромагнитного поля $(\mathbf{k}_1 \mathbf{A}) = 0$ (где \mathbf{k}_1 — волновой вектор) получаем

$$\varphi' = -\mathbf{rE}, \quad \mathbf{A}' = \left[[\mathbf{rk}] \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \theta} \right].$$

В заключение данного раздела приведем формулы для двух полезных частных случаев. Если $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$, то штрихованные компоненты 4-потенциала принимают вид

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = ct \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}}, \quad \varphi'(\mathbf{r}, t) = -t \frac{\partial \varphi}{\partial t}.$$

В случае когда $\varphi(\mathbf{r}, t) = 0$, получаем

$$A'_i(\mathbf{r}, t) = -x_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i}, \quad \varphi'(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{r}}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}.$$

В частности, если $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$, то

$$\mathbf{A}' = 0, \quad \varphi' = -\mathbf{rE}. \quad (13.15)$$

Таким образом, в длинноволновом приближении, т.е. когда длина волны электромагнитного излучения превышает размеры области пространственной локализации частицы (обычно это радиус атомных оболочек), градиентное преобразование с функцией (13.4) обнуляет векторный потенциал поперечного электромагнитного поля и приводит скалярный потенциал к виду электродипольного взаимодействия. Отметим, что и в этом случае взаимодействие является чисто электродипольным только в нерелятивистском приближении, когда полагается $E \approx m_0 c^2$ и отбрасывается слагаемое уравнения (13.7), пропорциональное φ'^2 .

13.2. Теория возмущений для взаимодействия атома с электромагнитным полем

В настоящем разделе мы обсудим традиционный подход к описанию взаимодействия излучения с веществом, основанный на разложении волновой функции по собственным волновым функциям свободного атома. Как следует из результатов предыдущего рассмотрения, выражения для амплитуд населенности уровней в случае спинорных и скалярных полей весьма близки. Это дает нам возможность в существенной степени опираться на результаты обсуждения, проведенного в гл. 6, и уделить основное внимание анализу матричных элементов и следующих из них правил отбора для переходов различной мультипольности.

13.2.1. Оператор взаимодействия. Задача о взаимодействии атома с электромагнитным полем является многочастичной задачей, поскольку даже водородоподобный атом состоит из двух частиц: ядра и электрона. Несмотря на то что масса ядра существенно превосходит массу электрона, ядро атома также участвует в процессе взаимодействия с внешним электромагнитным полем и, следовательно, влияет на характер отклика атома. Задача о взаимодействии водородоподобного атома с внешним электромагнитным полем более подробно будет рассмотрена позже. Однако в качестве нулевого приближения указанной общей многочастичной задачи мы можем использовать модель, основанную на предположении, что ядро водородоподобного атома имеет бесконечную массу. Тогда многочастичная задача о взаимодействии атома с внешним электромагнитным полем преобразуется в задачу о частице, взаимодействующей со стационарным внутриатомным полем $A_\mu^{(0)}(\mathbf{r}) = (\mathbf{A}_0, i\varphi_0)$ и полем внешней электромагнитной волны $A_\mu^{(e)}(\mathbf{r}, t) = (\mathbf{A}_e, i\varphi_e)$:

$$\left\{ \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_e \right)^2 + m_0^2 c^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 - q_0 \varphi_e \right)^2 \right] - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_0 - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0) - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_e - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_e) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) = 0,$$

где $U_0(\mathbf{r}) = q_0 \varphi_0(\mathbf{r})$ — внутриатомный потенциал, а $\mathbf{A}_0(\mathbf{r})$ — стационарный векторный потенциал, создаваемые неподвижным ионным остатком атома. Например, в задаче о движении электрона в кулоновском поле $U_0(\mathbf{r}) = -Ze^2/r$ и $\mathbf{A}_0(\mathbf{r}) = 0$.

Общий алгоритм решения задач о взаимодействии атома со слабыми электромагнитными полями состоит в следующем. Сначала находят собственные решения задачи для свободного атома, а затем решения задачи о взаимодействии атома с полем электромагнитной волны раскладываются по базису собственных функций задачи свободного атома. Необходимость привлечения указанного алгоритма связана с крайней сложностью решения даже простейшей задачи о движении

электрона в суперпозиции кулоновского поля и поля внешней плоской электромагнитной волны.

Следуя указанному алгоритму, уравнение (7.2) удобно записать в следующем виде:

$$(Z + V)\Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (13.16)$$

$$Z = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 - \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 \right] - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_0 - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0),$$

$$V = -\frac{q_0}{m_0 c} \mathbf{A}_e \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right) + \frac{q_0}{m_0 c^2} \varphi_e \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right) +$$

$$+ \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} (\mathbf{A}_e^2 - \varphi_e^2) - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_e - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_e). \quad (13.17)$$

В (13.17) мы воспользовались условием лоренцевской калибровки внешнего электромагнитного поля:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi_e}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{A}_e = 0.$$

13.2.2. Волновые функции свободного атома. Остановимся на обсуждении собственных решений свободного атома. Спектр собственных значений и собственных волновых функций определяется решением следующей задачи на собственные значения:

$$\frac{1}{2m_0} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_0 - i\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0) \right] \Psi_n =$$

$$= \frac{1}{2m_0 c^2} (E_n - U_0)^2 \Psi_n. \quad (13.18)$$

Граничные условия для краевой задачи (13.18) обсуждались выше, поэтому мы не будем останавливаться здесь на этом вопросе.

Определив спектр собственных решений краевой задачи (13.18), мы можем записать общее решение в виде:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_N \left[\left(a_N \Psi_N^{(+)}(\mathbf{r}) + b_N \gamma_5 \Psi_N^{(+)}(\mathbf{r}) \right) \exp \left(-i \frac{E_N^{(+)}}{\hbar} t \right) + \right.$$

$$\left. + \left(c_N \Psi_N^{(-)}(\mathbf{r}) + d_N \gamma_5 \Psi_N^{(-)}(\mathbf{r}) \right) \exp \left(i \frac{E_N^{(-)}}{\hbar} t \right) \right], \quad (13.19)$$

где N — набор квантовых чисел, характеризующих состояние электрона в атоме. Например, для электрона, взаимодействующего с кулоновским полем, набор квантовых чисел $N = (n_r, j, l, m)$ включает радиальное квантовое число n_r , полный угловой момент j , его проекцию m и орбитальный угловой момент l . Перепишем выражение (13.19)

в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{N, i, \lambda} a_{N, i, \lambda} \Psi_{N, i, \lambda}(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_N^{(\lambda)}}{\hbar} t\right),$$

где $\lambda = \pm 1$ нумерует положительно и отрицательно частотные решения, индекс $i = 1$ соответствует решениям с положительной нормой, $\int \overline{\Psi}_1(\mathbf{r}) \Psi_1(\mathbf{r}) dV > 0$, а индекс $i = 2$ относится к решениям с отрицательной нормой волновой функции: $\Psi_2(\mathbf{r}) = \gamma_5 \Psi_1(\mathbf{r})$. Вводя новый набор квантовых чисел $n = (n_r, j, l, m, i, \lambda)$, выражение (13.19) можно записать в следующем компактном виде:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n \Psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right). \quad (13.20)$$

Знак суммы в последнем выражении подразумевает суммирование по дискретным квантовым числам и интегрирование по непрерывным квантовым числам.

Мы записали решение (13.19) в наиболее общем виде. Отметим, что под отрицательно частотными решениями в (13.19) мы понимаем решения, описывающие состояния зеркальных частиц (спектр собственных значений которых включает и положительные собственные значения, отвечающие связанным состояниям зеркальных частиц), а не решения уравнения, комплексно сопряженного с уравнением (7.2). Учитывая результаты предыдущего анализа, несложно видеть, что при описании процессов, связанных с переходами валентных электронов атома, индуцируемыми внешним электромагнитным полем, мы можем ограничиться лишь решениями при коэффициентах a_N в (13.19). При описании процессов, затрагивающих состояния электронов внутренних оболочек атома, мы можем ограничиться решениями при коэффициентах a_N , c_N и d_N , поскольку это позволяет нам описать процессы ионизации внутренних оболочек атома, процесс K -захвата и т. д. Энергетические спектры состояний при коэффициентах b_N удалены от энергетических спектров состояний при коэффициентах a_N приблизительно на величину $2m_0c^2$. В принципе, волновая функция частицы является суперпозицией всех слагаемых в (13.19). Вместе с тем в настоящей главе мы ограничимся рассмотрением задач о взаимодействии одиночного атома с электромагнитным полем, поэтому индекс n можно было бы существенно упростить. Однако использование в формуле (13.20) многокомпонентного квантового числа n позволяет рассмотреть все возможные случаи. При этом размерность квантового числа n будет различна в различных частных случаях.

13.2.3. Уравнения для амплитуд населенности уровней. Итак, общее решение уравнения свободного атома имеет вид (13.20), где коэффициенты разложения определяются формулой (7.27в). Запишем

уравнение для атома, взаимодействующего с электромагнитной волной, в следующем виде:

$$\frac{1}{2m_0c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U \right)^2 \Psi = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \right] \Psi, \quad (13.21)$$

где $U = q_0\varphi = U_0 + U_e$, $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_e$, здесь φ_0 и \mathbf{A}_0 — потенциалы внутриатомного поля, а φ_e и \mathbf{A}_e — потенциалы электромагнитной волны. Уравнение для сопряженной собственной волновой функции свободного атома имеет вид

$$\frac{1}{2m_0c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + U_0 \right)^2 \bar{\Psi}_n = \bar{\Psi}_n \left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_0 - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0) \right]. \quad (13.22)$$

Умножая (13.21) слева на $\bar{\Psi}_n$, а (13.22) справа на Ψ и вычитая из первого получившегося уравнения второе, получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \left\{ \frac{1}{m_0c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}_n}{\partial t} \Psi - \bar{\Psi}_n \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \bar{\Psi}_n U_0 \Psi \right] dV \right\} = \\ = \frac{1}{m_0c^2} \int \bar{\Psi}_n \left[U_e \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right) + \frac{1}{2} \left(i\hbar \frac{\partial U_e}{\partial t} - U_e^2 \right) \right] \Psi dV + \\ + \frac{1}{2m_0} \int \bar{\Psi}_n \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 \right] \Psi dV - \\ - \mu_0 \int \bar{\Psi}_n [(\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) - (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}_0 - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0)] \Psi dV. \quad (13.23) \end{aligned}$$

Несложно видеть, что слагаемое в фигурных скобках представляет собой коэффициент разложения волновой функции уравнения (13.21) по собственным функциям уравнения свободного атома

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \Psi_n(\mathbf{r}, t), \quad (13.24)$$

где

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \Psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right).$$

Окончательно из (13.23) получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_m \int \bar{\Psi}_n \left[-\frac{q_0}{m_0c} A_\mu^{(e)} \left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu^{(0)} \right) + \right. \\ \left. + \frac{q_0^2}{2m_0c^2} A_\mu^{(e)} A_\mu^{(e)} - i \frac{\mu_0}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu}^{(e)} \right] \Psi_m dV \cdot a_m(t), \quad (13.25) \end{aligned}$$

где мы воспользовались условием лоренцевской калибровки внешнего электромагнитного поля.

Таким образом, решение системы уравнений (13.25) позволяет определить волновую функцию частицы, взаимодействующей с полем внешней электромагнитной волны, в виде разложения (13.24) по волновым функциям невозмущенной задачи. Несложно видеть, что оператор, стоящий в квадратных скобках выражения (13.25), совпадает с оператором взаимодействия (13.17)

$$V = -\frac{q_0}{m_0 c} A_\mu^{(e)} \left(p_\mu - \frac{q_0}{c} A_\mu^{(0)} \right) + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} A_\mu^{(e)} A_\mu^{(e)} - i \frac{\mu_0}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu}^{(e)}.$$

Как видно, первые два слагаемых в этом выражении совпадают с соответствующими слагаемыми оператора взаимодействия скалярной частицы. Эти слагаемые описывают взаимодействия, связанные с трансляционными степенями свободы движения частицы. Третье слагаемое описывает взаимодействия, связанные с наличием у спинорной частицы внутренних степеней свободы.

Поскольку трансляционная часть уравнения (7.2) совпадает с трансляционной частью уравнения КГФ, то здесь можно воспользоваться результатами раздела 6.1, в котором обсуждались условия возможности симметризации матричных элементов V_{nm} . Не повторяя обсуждения, приведенного в разделах 6.1.1–6.1.2, запишем указанные матричные элементы в симметризованном виде:

$$V_{nm} = \int \bar{\Psi}_n V \Psi_m dV = -\frac{1}{c} \int A_\mu^{(e)} j_{nm,\mu}^{(t)} dV - i \frac{\mu_0}{2} \int \bar{\Psi}_n \gamma_\mu \gamma_\nu F_{\nu\mu}^{(e)} \Psi_m dV + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_n A_\mu^{(e)} A_\mu^{(e)} \Psi_m dV, \quad (13.26)$$

где $j_{nm,\mu}^{(t)}$ — матричные элементы трансляционной части 4-вектора плотности тока, определяемые формулами, аналогичными формулам (6.11а, б). Напомним, что симметризованные матричные элементы обладают следующим свойством:

$$V_{nm} = V_{mn}^*.$$

В случае скалярной частицы знак заряда и энергии частицы определяет лишь частотность решения. В спинорном случае знаки заряда и энергии частицы зависят от двух квантовых чисел (i, λ) , поэтому, чтобы не усложнять форму записи уравнений (13.25), мы использовали одно шестикомпонентное квантовое число n . Однако ясно, что, представляя его в виде двух наборов квантовых чисел, (n_r, j, l, m) и (i, λ) , несложно получить соотношения, аналогичные соотношениям (6.12) и (6.13). В связи с последним отметим снова, что в задачах, связанных с рассмотрением одиночного атома, квантовое число i , как правило, является избыточным.

Поскольку трансляционная часть плотности тока спинорной частицы совпадает с плотностью тока скалярной частицы, мы можем не повторять преобразований, выполненных в разделе 6.1.3, а непосредственно воспользоваться формулами (6.17)–(6.19):

$$\mathbf{e}_i \mathbf{j}_{nm}^{(t)} = \mathbf{e}_i \left(\frac{\partial \mathbf{P}_{nm}^{(t)}}{\partial t} + c \operatorname{rot} \mathbf{M}_{nm}^{(t)} \right) + \operatorname{div} (\mathbf{r} (\mathbf{e}_i \mathbf{j}_{nm}^{(t)})), \quad (13.27)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{nm}^{(t)} &= \frac{q_0}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \bar{\Psi}_n \cdot \Psi_m - \bar{\Psi}_n \nabla \Psi_m) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi}_n \mathbf{A}_0 \Psi_m \right], \\ \mathbf{P}_{nm}^{(t)}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{r} \rho_{nm}^{(t)} = \\ &= \frac{q_0}{2m_0 c^2} \left[\bar{\Psi}_n \cdot \mathbf{r} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right) \Psi_m + \mathbf{r} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right) \bar{\Psi}_n \cdot \Psi_m \right], \\ \mathbf{M}_{nm}^{(t)}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{c} [\mathbf{r} \mathbf{j}_{nm}^{(t)}] = \frac{q_0 \hbar}{2m_0 c} (\bar{\Psi}_n \cdot \mathbf{L} \Psi_m - \mathbf{L} \bar{\Psi}_n \cdot \Psi_m). \end{aligned}$$

Подставляя (13.27) в (13.26), после несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} V_{nm} &= - \int (\mathbf{P}_{nm}^{(t)} + \mathbf{P}_{nm}^{(s)}) \mathbf{E} dV - \int (\mathbf{M}_{nm}^{(t)} + \mathbf{M}_{nm}^{(s)}) \mathbf{B} dV + \\ &\quad + \int \rho_{nm} \varphi dV + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \int \bar{\Psi}_n (\mathbf{A}^2 - \varphi^2) \Psi_m dV - \\ &\quad - \frac{1}{c} \frac{d}{dt} \int \mathbf{A} \mathbf{P}_{nm}^{(t)} dV - \frac{1}{c} \int \mathbf{P}_{nm}^{(t)} \nabla \varphi dV - \frac{1}{c} \int (\mathbf{e}_i \mathbf{A}) \operatorname{div} (\mathbf{r} (\mathbf{e}_i \mathbf{j}_{nm}^{(t)})) dV, \end{aligned} \quad (13.28)$$

где мы опустили индекс у компонент потенциала внешнего поля и воспользовались обозначениями (7.21)–(7.22).

Первые два слагаемых в (13.28) имеют стандартный вид электрического V_e и магнитного V_m взаимодействий, т. е. взаимодействий электрической и магнитной поляризации материального поля с электрическим и магнитным полем электромагнитной волны соответственно. Как видно, в отличие от случая скалярной частицы, величина векторов электрической и магнитной поляризации частицы определяется как ее трансляционным движением, так и ориентационным (обусловленным наличием внутренних степеней свободы). Третье слагаемое описывает взаимодействие частицы со скалярным внешним полем. Четвертое слагаемое описывает так называемое пондеромоторное взаимодействие. Следующие два слагаемых появились в результате преобразования произведения $\mathbf{A} \partial \mathbf{P}_{nm}^{(t)} / \partial t$ к виду $\mathbf{P}_{nm}^{(t)} \mathbf{E}$. Они обращаются в нуль, если частица взаимодействует с поперечным резонансным ($\omega \approx \omega_{nm}$) внешним полем. Последнее слагаемое в (13.28) обусловлено последним слагаемым в (13.27); как мы отмечали в гл. 5, этим слагаемым можно пренебречь в длинноволновом приближении $\lambda \gg a_B$.

13.2.4. Угловые зависимости матричных элементов. Энергетический спектр электрона, движущегося в кулоновском поле, был рассчитан в гл. 12. Как мы уже неоднократно отмечали, рассчитанный спектр близок к реальному спектру водородоподобного атома с очень тяжелым ядром, поэтому воспользуемся результатами гл. 12 для анализа взаимодействия атома с электромагнитным полем. Угловые зависимости волновых функций стандартного базиса и базиса состояний зеркальных частиц совпадают, поэтому пока мы интересуемся правилами отбора, определяющимися исключительно угловой частью волновых функций, можно не конкретизировать, с каким базисом состояний мы имеем дело.

Нормированные волновые функции состояний частицы или зеркальной частицы в кулоновском поле имеют вид

$$\begin{aligned}\Psi_{njm}^{(l=j-1/2)}(\mathbf{r}) &= \Psi_{jm}^{(1)}(\theta, \varphi) R_{n,j,l=j-1/2}(r), \\ \Psi_{njm}^{(l=j+1/2)}(\mathbf{r}) &= \Psi_{jm}^{(2)}(\theta, \varphi) R_{n,j,l=j+1/2}(r).\end{aligned}\quad (13.29)$$

Угловая зависимость волновых функций (13.29) определяется биспинорами

$$\begin{aligned}\Psi_{jm}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} \\ -\zeta \Omega_{j,l+1,m}^{(2)} \end{pmatrix}, \\ \Psi_{jm}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(2)} \\ -\zeta \Omega_{j,l-1,m}^{(1)} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (13.30)$$

Все обозначения, использованные в формулах (13.29)–(13.30), совпадают с обозначениями, введенными в разделе 12.4.

Учитывая соотношения (12.45), биспиноры (13.30) можно записать в виде

$$\begin{aligned}\Psi_{jm}^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{1-\zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(1)} \\ i\zeta_j \sigma_r \Omega_{jlm}^{(1)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-\zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jm}^{(+)} \\ i\zeta_j \sigma_r \Omega_{jm}^{(+)} \end{pmatrix}, \\ \Psi_{jm}^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{1-\zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}^{(2)} \\ -i\zeta_j \sigma_r \Omega_{jlm}^{(2)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-\zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jm}^{(-)} \\ -i\zeta_j \sigma_r \Omega_{jm}^{(-)} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (13.31)$$

где мы подчеркнули важное для дальнейшего рассмотрения обстоятельство, что параметр ζ , определенный в разделе 12.4.1, зависит от величины полного углового момента. Смысл введенных обозначений вполне понятен: знак плюс относится к состояниям, для которых полный угловой момент является суммой орбитального углового момента и спина, а знак минус — их разностью. Введенные в формулах (13.31) обозначения позволяют в более компактной форме записать последующие выражения. Действительно,

$$\Psi_{jm}^{(\lambda)} = \frac{1}{\sqrt{1-\zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jm}^{(\lambda)} \\ i\lambda \zeta_j \sigma_r \Omega_{jm}^{(\lambda)} \end{pmatrix}, \quad (13.32)$$

где $\lambda = \pm 1$.

В длинноволновом приближении матричные элементы, входящие в выражение (13.28), принимают вид

$$\mathbf{d}_{nm}^{(t)} = \frac{q_0}{m_0 c^2} \int R_n(r) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(r) \right) R_m(r) r^3 dr \int \bar{\Psi}_n \mathbf{e}_r \Psi_m d\omega, \quad (13.33a)$$

$$\mathbf{d}_{nm}^{(s)} = -i\mu_0 \int R_n(r) R_m(r) r^2 dr \int \bar{\Psi}_n \boldsymbol{\alpha} \Psi_m d\omega, \quad (13.33б)$$

$$\mathbf{m}_{nm}^{(t)} = \mu_B \int R_n(r) R_m(r) r^2 dr \int \bar{\Psi}_n \mathbf{l} \Psi_m d\omega, \quad (13.33в)$$

$$\mathbf{m}_{nm}^{(s)} = \mu_0 \int R_n(r) R_m(r) r^2 dr \int \bar{\Psi}_n \boldsymbol{\Sigma} \Psi_m d\omega, \quad (13.33г)$$

$$q_{nm} = \int \rho_{nm}(\mathbf{r}) dV = \frac{q_0}{m_0 c^2} \int R_n(r) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(r) \right) R_m(r) r^2 dr \int \bar{\Psi}_n \Psi_m d\omega. \quad (13.33д)$$

Во избежание недоразумений отметим, что индексы n и m в (13.33) являются совокупностью квантовых чисел: радиального квантового числа, полного углового момента, его проекции, орбитального углового момента и индекса, указывающего, к какому базису относится волновая функция. Напомним также, что матричные элементы (13.33д) для волновых функций состояний с различной энергией, но относящихся к одному и тому же базису, равны нулю. Запишем биспиноры (13.32) в следующем виде:

$$\Psi_{jm}^{(\lambda)} = U_r \psi_{jm}^{(\lambda)}, \quad (13.34)$$

где

$$\psi_{jm}^{(\lambda)} = \frac{1}{\sqrt{1 - \zeta_j^2}} \begin{pmatrix} \Omega_{jm}^{(\lambda)} \\ i\lambda\zeta_j\Omega_{jm}^{(\lambda)} \end{pmatrix} \quad (13.35)$$

и матрица U_r имеет вид

$$U_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sigma_r \end{pmatrix}.$$

Матрица U_r является самосопряженной,

$$U_r^+ = U_r,$$

и унитарной:

$$U_r^+ U_r = I.$$

Удобство введения биспиноров (13.35) состоит в том, что и верхний и нижний спиноры имеют в этом случае одинаковый вид. Биспиноры (13.35) удовлетворяют соотношениям ортогональности:

$$\int \bar{\psi}_{j'm'}^{(\lambda')} \psi_{jm}^{(\lambda)} d\omega = \delta_{j'j} \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{m'm}.$$

Используя (13.34), для произвольного оператора L получаем

$$\overline{\Psi}_{j'm'}^{(\lambda')} L \Psi_{jm}^{(\lambda)} = \overline{\psi}_{j'm'}^{(\lambda')} L' \psi_{jm}^{(\lambda)},$$

где

$$L' = U_r^+ L U_r. \quad (13.36)$$

Например,

$$\mathbf{r}' = U_r^+ \mathbf{r} U_r = \mathbf{r}, \quad (13.37a)$$

$$\boldsymbol{\alpha}' = U_r^+ \boldsymbol{\alpha} U_r = -\mathbf{e}_r \gamma_5 - [\mathbf{e}_r, \boldsymbol{\gamma}], \quad (13.37b)$$

$$\mathbf{I}' = U_r^+ \mathbf{I} U_r = \mathbf{I} + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{e}_r \Sigma_r) (1 - \gamma_4), \quad (13.37в)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}' = U_r^+ \boldsymbol{\Sigma} U_r = \boldsymbol{\Sigma} - (\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{e}_r \Sigma_r) (1 - \gamma_4). \quad (13.37г)$$

Мы уже отмечали выше, что состояние частицы во внешнем электрическом поле является суперпозицией положительных и отрицательных квартионных состояний. Поскольку направления спинов в положительных и отрицательных квартионных состояниях противоположны, то, как видно из (13.30), состояниям частицы в сферически симметричном внешнем поле с заданной величиной полного углового момента отвечают положительное и отрицательное квартионные состояния, величина орбитального углового момента которых отличается на ± 1 . Напротив, оба спинора биспинорной волновой функции (13.35) отвечают одному и тому же значению орбитального углового момента. Такие состояния не являются собственными состояниями частицы во внешнем сферически симметричном поле. Однако операторы сохраняющих величин остаются неизменными при преобразовании (13.36). Действительно,

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}, \quad \mathbf{j}' = \mathbf{I}' + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}' = \mathbf{I} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{j}.$$

13.2.5. Правила отбора для электродипольных переходов.

Используя вышеприведенные формулы, для матричных элементов (13.33а) получаем

$$\mathbf{d}^{(t)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = d_0 \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')\dagger} \mathbf{e}_r \Omega_{jm}^{(\lambda)} d\omega, \quad (13.38)$$

где

$$d_0 = \frac{1 - \lambda\lambda'\zeta\zeta'}{\sqrt{(1 - \zeta^2)(1 - \zeta'^2)}} \frac{q_0}{m_0 c^2} \int R_n(r) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(r) \right) R_m(r) r^3 dr. \quad (13.39)$$

Учитывая (13.37б), матричные элементы (13.33б) удобно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}^{(s)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) &= i\mu_0 \int R_{n'j'l'}(r) R_{njl}(r) r^2 dr \times \\ &\times \left[\int \overline{\psi}_{j'm'}^{(\lambda')} \mathbf{e}_r \gamma_5 \psi_{jm}^{(\lambda)} d\omega + \int \overline{\psi}_{j'm'}^{(\lambda')} [\mathbf{e}_r, \boldsymbol{\gamma}] \psi_{jm}^{(\lambda)} d\omega \right]. \end{aligned} \quad (13.40)$$

Первое слагаемое в (13.40) с использованием вышеприведенных формул принимает вид

$$\mathbf{d}_1^{(s)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = d_1 \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda)'} \mathbf{e}_r \Omega_{jm}^{(\lambda)} d\omega, \quad (13.41)$$

где

$$d_1 = -\mu_0 \frac{(\lambda\zeta + \lambda'\zeta')}{\sqrt{(1-\zeta^2)(1-\zeta'^2)}} \int R_n(r) R_m(r) r^2 dr. \quad (13.42)$$

Как видно, угловые зависимости матричных элементов (13.38) и (13.41) гамильтониана электродипольного взаимодействия приводят к одинаковым правилам отбора, которые определяются матричными элементами оператора

$$\mathbf{e}_r = \mathbf{e}_+ \sin \theta \exp(-i\varphi) + \mathbf{e}_- \sin \theta \exp(i\varphi) + \mathbf{e}_z \cos \theta, \quad (13.43)$$

где

$$\mathbf{e}_{\pm} = \frac{1}{2} (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y).$$

Ниже приведены ненулевые матричные элементы оператора (13.43):

$$\int \Omega_{j+1, m-1}^{(\lambda)+} \sin \theta \exp(-i\varphi) \Omega_{j, m}^{(\lambda)} d\omega = -i \frac{\sqrt{(j-m+1)(j-m+2)}}{2(j+1)}, \quad (13.44)$$

$$\int \Omega_{j-1, m-1}^{(\lambda)+} \sin \theta \exp(-i\varphi) \Omega_{j, m}^{(\lambda)} d\omega = -i \frac{\sqrt{(j+m-1)(j+m)}}{2j}, \quad (13.45)$$

$$\int \Omega_{j+1, m+1}^{(\lambda)+} \sin \theta \exp(i\varphi) \Omega_{j, m}^{(\lambda)} d\omega = i \frac{\sqrt{(j+m+1)(j+m+2)}}{2(j+1)}, \quad (13.46)$$

$$\int \Omega_{j-1, m+1}^{(\lambda)+} \sin \theta \exp(i\varphi) \Omega_{j, m}^{(\lambda)} d\omega = i \frac{\sqrt{(j-m-1)(j-m)}}{2j}, \quad (13.47)$$

$$\int \Omega_{j+1, m}^{(\lambda)+} \cos \theta \Omega_{j, m}^{(\lambda)} d\omega = -i \frac{\sqrt{(j-m+1)(j+m+1)}}{2(j+1)}, \quad (13.48)$$

$$\int \Omega_{j-1, m}^{(\lambda)+} \cos \theta \Omega_{j, m}^{(\lambda)} d\omega = i \frac{\sqrt{(j-m)(j+m)}}{2j}. \quad (13.49)$$

В соответствии с правилом треугольника для сложения угловых моментов остальные матричные элементы между состояниями с одинаковым значением $\lambda = \pm 1$ равны нулю.

Матричные элементы переходов между состояниями $\Psi_{jm}^{(+)}$ и $\Psi_{j'm'}^{(-)}$ имеют следующий вид:

$$\int \Omega_{j, m-1}^{(-)+} \sin \theta \exp(-i\varphi) \Omega_{j, m}^{(+)} d\omega = i \frac{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}}{2j(j+1)}, \quad (13.50)$$

$$\int \Omega_{j, m+1}^{(-)+} \sin \theta \exp(i\varphi) \Omega_{j, m}^{(+)} d\omega = i \frac{\sqrt{(j-m)(j+m+1)}}{2j(j+1)}, \quad (13.51)$$

$$\int \Omega_{j, m}^{(-)+} \cos \theta \Omega_{j, m}^{(+)} d\omega = i \frac{m}{2j(j+1)}. \quad (13.52)$$

Таким образом, в отличие от (13.44)–(13.49), матричные элементы радиуса-вектора между состояниями $\Psi_{jm}^{(+)}$ и $\Psi_{j'm'}^{(-)}$ не равны нулю при $j' = j$. Это и понятно, поскольку пространственная четность состояний, как мы отмечали в гл. 7, 12, определяется четностью верхнего спинора биспинорной волновой функции. При данном значении j верхние спиноры функций $\Psi_{jm}^{(+)}$ и $\Psi_{j'm'}^{(-)}$ имеют противоположную четность, поэтому отличными от нуля являются матричные элементы с $j' = j$ и равными нулю оказываются матричные элементы с $j' = j \pm 1$. Матричные элементы всех других переходов равны нулю в соответствии с правилом треугольника для сложения угловых моментов.

Обратимся ко второму слагаемому матричных элементов (13.40):

$$\mathbf{d}_2^{(s)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = - \int \bar{\psi}_{j'm'}^{(\lambda')} [\mathbf{e}_r \boldsymbol{\gamma}] \psi_{jm}^{(\lambda)} do. \quad (13.53)$$

Подставим в (13.53) оператор $\boldsymbol{\gamma}$ в виде

$$\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{e}_+ \gamma_- + \mathbf{e}_- \gamma_+ + \mathbf{e}_z \gamma_3,$$

где

$$\gamma_{\pm} = \gamma_1 \pm i\gamma_2,$$

тогда для матричных элементов (13.53) получаем

$$\mathbf{e}_+ \mathbf{d}_2^{(s)} = d_2 \int \left[\Omega_{j'm'}^{(\lambda') +} \cos \theta \sigma_+ \Omega_{jm}^{(\lambda)} - \Omega_{j'm'}^{(\lambda') +} \sin \theta \exp(i\varphi) \sigma_3 \Omega_{jm}^{(\lambda)} \right] do, \quad (13.54a)$$

$$\mathbf{e}_- \mathbf{d}_2^{(s)} = -d_2 \int \left[\Omega_{j'm'}^{(\lambda') +} \cos \theta \sigma_- \Omega_{jm}^{(\lambda)} - \Omega_{j'm'}^{(\lambda') +} \sin \theta \exp(-i\varphi) \sigma_3 \Omega_{jm}^{(\lambda)} \right] do, \quad (13.54b)$$

$$\mathbf{e}_z \mathbf{d}_2^{(s)} = d_2 \int \left[\Omega_{j'm'}^{(\lambda') +} \sin \theta \exp(i\varphi) \sigma_- \Omega_{jm}^{(\lambda)} - \Omega_{j'm'}^{(\lambda') +} \sin \theta \exp(-i\varphi) \sigma_+ \Omega_{jm}^{(\lambda)} \right] do, \quad (13.54в)$$

где

$$d_2 = \mu_0 \frac{\lambda\zeta - \lambda'\zeta'}{2\sqrt{(1-\zeta^2)(1-\zeta'^2)}} \int R_n(r) R_m(r) r^2 dr. \quad (13.55)$$

Из (13.54) следует, что правила отбора, определяемые матричными элементами (13.53), совпадают с правилами отбора, определяемыми матричными элементами (13.38) и (13.41).

Сравним величину матричных элементов. Радиальные волновые функции стандартного базиса для водородоподобного атома имеют вид

$$R_{n,j,l=j\mp 1/2}(r) = \frac{2}{(n+s_{\pm}+1)^2 + Z^2 \alpha^2} \sqrt{\left(\frac{Z}{a_B}\right)^3 \frac{n!}{\Gamma(n+2s_{\pm}+2)}} \times \\ \times \exp(-\kappa r) (2\kappa r)^{s_{\pm}} L_n^{(2s_{\pm}+1)}(2\kappa r), \quad (13.56)$$

поэтому радиальные матричные элементы, входящие в выражение (13.39), определяются интегралом

$$\begin{aligned} \langle n_1, j_1, l_1 | r | n_2, j_2, l_2 \rangle &= \frac{a_B}{4Z} (2k_1)^{s_1+2} (2k_2)^{s_2+2} \times \\ &\times \sqrt{\frac{n_1! n_2!}{\Gamma(n_1 + 2s_1 + 2) \Gamma(n_2 + 2s_2 + 2)}} \int_0^\infty L_{n_1}^{(2s_1+1)}(2k_1 x) L_{n_2}^{(2s_2+1)}(2k_2 x) \times \\ &\times (2k_2 x) \left(\frac{E_1 + E_2}{2m_0 c^2} + \frac{Z\alpha^2}{x} \right) \exp(-(k_1 + k_2)x) x^{s_1+s_2+3} dx, \quad (13.57) \end{aligned}$$

где a_B — боровский радиус и

$$k_{1,2} = \kappa_{1,2} a_B = \frac{Z}{\sqrt{(n_{1,2} + s_{1,2} + 1)^2 + Z^2 \alpha^2}}.$$

В гл. 12 мы показали, что в пределе $\alpha \rightarrow 0$ волновые функции (13.56) преобразуются в волновые функции нерелятивистского уравнения Шредингера. Естественно поэтому сравнить полученные матричные элементы с матричными элементами нерелятивистской теории. На рис. 13.1 эти матричные элементы показаны в сравнении для перехода $\langle n_1 = 0, j_1 = 1/2, l_1 = 0 | r | n_2 = n, j_2 = 1/2, l_2 = 1 \rangle$ и значений заряда ядра $Z = 1$ (а), 50 (б), 100 (в). Из рисунка видно, что даже при $Z = 50$ указанные матричные элементы различаются незначительно и лишь при $Z \approx 100$ отличие становится существенным. Такое поведение матричных элементов вполне предсказуемо. Действительно, отношение средней потенциальной энергии электрона в атоме к энергии состояния определяется следующим выражением:

$$\frac{\langle \Psi_n | U_0 | \Psi_n \rangle}{E_n} = \frac{Z^2 \alpha^2}{(n + s + 1)^2}.$$

Средняя величина потенциальной энергии определяет характерную величину энергии перехода из основного состояния атома в возбужденное. Поскольку для состояний стандартного базиса состояний $E_n \approx m_0 c^2$, то релятивистские эффекты не оказывают существенного влияния на радиационные свойства переходов между состояниями стандартного базиса, так как в этом случае $\langle U_0 \rangle \ll m_0 c^2$.

Радиальная часть матричных элементов (13.42) и (13.55) отличается от радиальной части матричных элементов (13.39) и является малой по сравнению с ними. Действительно, радиальные матричные элементы (13.55) имеют вид

$$d_{nm}^{(s)} = \int R_n(r) R_m(r) r^2 dr.$$

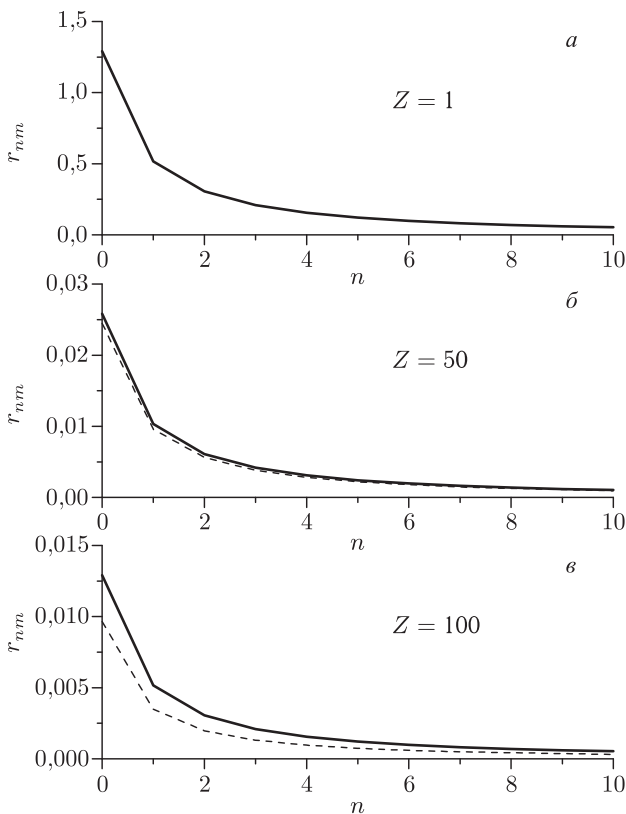


Рис. 13.1. Зависимость величины матричных элементов $\langle n_1 = 0, j_1 = 1/2, l_1 = 0 | r | n_2 = n, j_2 = 1/2, l_2 = 1 \rangle$ от разности значений радиальных квантовых чисел начального и конечного состояний, $n_2 - n_1 = n$, для значений заряда ядра атома $Z = 1$ (а), 50 (б), 100 (в)

Учитывая, что

$$\frac{1}{m_0 c^2} \int R_n(r) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(r) \right) R_m(r) r^2 dr = 0,$$

для переходов между состояниями стандартного базиса получаем

$$\int R_n(r) R_m(r) r^2 dr \approx \frac{1}{m_0 c^2} \int R_n(r) U_0(r) R_m(r) r^2 dr.$$

Как мы отмечали выше, правая часть имеет величину порядка $Z^2 \alpha^2$, т. е. является малой для легких ядер.

Окончательно для величины матричных элементов (13.39), (13.42) и (13.55) получаем следующие оценки:

$$d_0 \approx \frac{q_0 a_B}{Z} = \frac{\mu_B}{Z\alpha}, \quad d_{1,2} \approx \mu_0 Z\alpha \frac{Z^2 \alpha^2}{(n+s+1)^2}, \quad (13.58)$$

где μ_B — магнетон Бора.

Таким образом, при переходах между состояниями стандартного базиса состояний матричные элементы (13.41) и (13.53) не вносят изменений в правила отбора, определяемые матричными элементами (13.38), и приводят к незначительному вкладу в величину трансляционных матричных элементов, по крайней мере для атомов с легкими ядрами.

13.2.6. Правила отбора для магнитодипольных переходов.

Правила отбора при магнитодипольных переходах определяются матричными элементами (13.33в, г)

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^{(t)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) &= \mu_B \int R_{n'j'l'}(r) R_{njl}(r) r^2 dr \int \bar{\Psi}_{j'm'}^{(\lambda')} \mathbf{I} \Psi_{jm}^{(\lambda)} do, \\ \mathbf{m}^{(s)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) &= \mu_0 \int R_{n'j'l'}(r) R_{njl}(r) r^2 dr \int \bar{\Psi}_{j'm'}^{(\lambda')} \boldsymbol{\Sigma} \Psi_{jm}^{(\lambda)} do. \end{aligned}$$

Используя (13.37в), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^{(t)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) &= \\ &= \frac{\mu_B \int R_{n'j'l'}(r) R_{njl}(r) r^2 dr}{\sqrt{(1-\zeta'^2)(1-\zeta^2)}} \left[(1-\lambda\lambda'\zeta\zeta') \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \mathbf{I} \Omega_{jm}^{(\lambda)} do - \right. \\ &\quad \left. - \lambda\lambda'\zeta\zeta' \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \boldsymbol{\sigma} \Omega_{jm}^{(\lambda)} do + \lambda\lambda'\zeta\zeta' \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \mathbf{e}_r \sigma_r \Omega_{jm}^{(\lambda)} do \right], \quad (13.59a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^{(s)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) &= \\ &= \frac{\mu_0 \int R_{n'j'l'}(r) R_{njl}(r) r^2 dr}{\sqrt{(1-\zeta'^2)(1-\zeta^2)}} \left[(1+\lambda\lambda'\zeta\zeta') \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \boldsymbol{\sigma} \Omega_{jm}^{(\lambda)} do - \right. \\ &\quad \left. - 2\lambda\lambda'\zeta\zeta' \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \mathbf{e}_r \sigma_r \Omega_{jm}^{(\lambda)} do \right]. \quad (13.59б) \end{aligned}$$

Как следует из (13.59), правила отбора определяются следующими тремя угловыми матричными элементами:

$$\mathbf{m}^{(1)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \mathbf{I} \Omega_{jm}^{(\lambda)} do, \quad (13.60a)$$

$$\mathbf{m}^{(2)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \boldsymbol{\sigma} \Omega_{jm}^{(\lambda)} do, \quad (13.60б)$$

$$\mathbf{m}^{(3)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')} + \mathbf{e}_r \sigma_r \Omega_{jm}^{(\lambda)} do. \quad (13.60в)$$

Представим спиноры $\Omega_{jm}^{(\lambda)}$ в виде

$$\Omega_{jm}^{(\lambda)} = \begin{pmatrix} a_{jm}^{(\lambda)} Y_{j-\lambda/2, m-1/2} \\ b_{jm}^{(\lambda)} Y_{j-\lambda/2, m+1/2} \end{pmatrix}.$$

При поляризации внешнего магнитного поля $\mathbf{B} = \mathbf{e}_z B$ для проекций векторов (13.60) получаем

$$m_z^{(1)} = \left(m - \frac{1}{2}\right) a_{j'm'}^{(\lambda)*} a_{jm}^{(\lambda)} \delta_{j'-\lambda'/2, j-\lambda/2} \delta_{m'-1/2, m-1/2} + \\ + \left(m + \frac{1}{2}\right) b_{j'm'}^{(\lambda)*} b_{jm}^{(\lambda)} \delta_{j'-\lambda'/2, j-\lambda/2} \delta_{m'+1/2, m+1/2}, \quad (13.61a)$$

$$m_z^{(2)} = a_{j'm'}^{(\lambda)*} a_{jm}^{(\lambda)} \delta_{j'-\lambda'/2, j-\lambda/2} \delta_{m'-1/2, m-1/2} - \\ - b_{j'm'}^{(\lambda)*} b_{jm}^{(\lambda)} \delta_{j'-\lambda'/2, j-\lambda/2} \delta_{m'+1/2, m+1/2}, \quad (13.61б)$$

$$m_z^{(3)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = i\lambda \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')\dagger} \cos\theta \Omega_{jm}^{(-\lambda)} d\omega. \quad (13.61в)$$

При выводе (13.61в) мы воспользовались соотношением $\Omega_{jm}^{(\lambda)} = i\lambda \sigma_r \Omega_{jm}^{(-\lambda)}$. Выражения (13.61а, б) приводят к следующим правилам отбора:

$$j' = j + \frac{\lambda' - \lambda}{2}, \quad m' = m.$$

Следовательно, при $\lambda' = \lambda$

$$j' = j, \quad m' = m; \quad (13.62a)$$

а при $\lambda' = -\lambda$

$$j' = j - \lambda, \quad m' = m. \quad (13.62б)$$

Матричные элементы (13.61в) были рассчитаны выше, и из них вытекают следующие правила отбора:

$$j' = j + \frac{\lambda' + \lambda}{2} \pm 1, \quad m' = m.$$

Учитывая правило треугольника для сложения угловых моментов, получаем при $\lambda' = \lambda$:

$$j' = j, \quad m' = m, \quad (13.63a)$$

а при $\lambda' = -\lambda$:

$$j' = j \pm 1, \quad m' = m. \quad (13.63б)$$

Сравнивая выражения (13.62) и (13.63), мы видим, что правила отбора, определяемые всеми тремя матричными элементами (13.60а–в), совпадают.

В случае циркулярно поляризованной электромагнитной волны можно воспользоваться хорошо известными выражениями для матричных элементов оператора углового момента:

$$\begin{aligned} \int Y_{l'm'}^* l_+ Y_{lm} d\omega &= \sqrt{(l+m+1)(l-m)} \delta_{l'l} \delta_{m'(m+1)}, \\ \int Y_{l'm'}^* l_- Y_{lm} d\omega &= \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \delta_{l'l} \delta_{m'(m-1)}. \end{aligned}$$

Используя эти соотношения, получаем

$$\begin{aligned} m_+^{(1)} &= \sqrt{(j-\lambda/2+m+1/2)(j-\lambda/2-m+1/2)} \times \\ &\quad \times a_{j'm'}^{(\lambda)*} a_{jm}^{(\lambda)} \delta_{j'-\lambda'/2, j-\lambda/2} \delta_{m'-1/2, m+1/2} + \\ &\quad + \sqrt{(j-\lambda/2+m+3/2)(j-\lambda/2-m-1/2)} \times \\ &\quad \times b_{j'm'}^{(\lambda)*} b_{jm}^{(\lambda)} \delta_{j'-\lambda'/2, j-\lambda/2} \delta_{m'+1/2, m+3/2}, \end{aligned} \quad (13.64a)$$

$$m_+^{(2)} = a_{j'm'}^{(\lambda)*} b_{jm}^{(\lambda)} \delta_{j'-\lambda'/2, j-\lambda/2} \delta_{m'-1/2, m+1/2}, \quad (13.64б)$$

$$m_+^{(3)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) = \frac{i\lambda}{2} \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda)+} \sin\theta \exp(i\varphi) \Omega_{jm}^{(-\lambda)} d\omega. \quad (13.64в)$$

Выражения (13.64а, б) приводят к следующим правилам отбора:

$$j' = j + \frac{\lambda' - \lambda}{2}, \quad m' = m + 1.$$

Следовательно, при $\lambda' = \lambda$

$$j' = j, \quad m' = m + 1, \quad (13.65a)$$

а при $\lambda' = -\lambda$

$$j' = j - \lambda, \quad m' = m + 1. \quad (13.65б)$$

Матричные элементы (13.64в) были рассчитаны выше, и из них вытекают следующие правила отбора:

$$j' = j + \frac{\lambda' + \lambda}{2} \pm 1, \quad m' = m + 1.$$

Учитывая правило треугольника для сложения угловых моментов, получаем при $\lambda' = \lambda$:

$$j' = j, \quad m' = m + 1, \quad (13.66a)$$

а при $\lambda' = -\lambda$:

$$j' = j \pm 1, \quad m' = m + 1. \quad (13.66б)$$

Сравнивая выражения (13.65) и (13.66), мы видим, что правила отбора, определяемые всеми тремя матричными элементами (13.60а-в), совпадают.

Случай, когда электромагнитное поле имеет поляризацию $\mathbf{B} = \mathbf{e}_- B^{(-)}$, можно отдельно не рассматривать ввиду эрмитовости опе-

ратора взаимодействия V . Выпишем правила отбора, соответствующие этому случаю. Они имеют вид: при $\lambda' = \lambda$

$$j' = j, \quad m' = m - 1, \quad (13.67a)$$

при $\lambda' = -\lambda$

$$j' = j \pm 1, \quad m' = m - 1. \quad (13.67б)$$

В отличие от электрического дипольного момента, величины магнитного дипольного момента, обусловленного движением по трансляционным и внутренним степеням свободы частицы, оказываются близки. Действительно, из (13.59а, б) получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^{(t)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) &\approx \mu_B \int R_{n'j'l'}(r)R_{njl}(r)r^2 dr, \\ \mathbf{m}^{(s)}(j'm'\lambda'|jm\lambda) &\approx \mu_0 \int R_{n'j'l'}(r)R_{njl}(r)r^2 dr. \end{aligned}$$

Используя оценки, приведенные в предыдущем разделе, для переходов между состояниями стандартного базиса получаем

$$|\mathbf{m}^{(t,s)}| \approx \mu_0 \frac{Z^2 \alpha^2}{(n+s+1)^2}. \quad (13.68)$$

13.2.7. Переходы при взаимодействии со скалярным полем.

Третье слагаемое в выражении (13.28) для матричных элементов гамильтониана взаимодействия отвечает за процессы взаимодействия атома со скалярным потенциалом. В длинноволновом приближении правила отбора определяются матричными элементами (13.33д)

$$q_{nm} = \int \rho_{nm}(\mathbf{r}) dV = \frac{q_0}{m_0 c^2} \int R_n(r) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(r) \right) R_m(r) r^2 dr \int \bar{\Psi}_n \Psi_m d\Omega.$$

Ввиду ортогональности спиноров $\Omega_{jm}^{(\lambda)}$ угловая часть матричных элементов приводит к следующим правилам отбора:

$$j' = j, \quad m' = m, \quad \lambda' = \lambda. \quad (13.69)$$

Радиальная часть матричных элементов равна нулю для переходов между состояниями, принадлежащими одному и тому же базису, поэтому отличными от нуля являются лишь матричные элементы переходов между состояниями, принадлежащими различным базисам и имеющими одинаковые значения полного углового момента, его проекции и орбитального углового момента:

$$\begin{aligned} q \left(n_1^{(i)}, j, m, l | n_2^{(j)}, j, m, l \right) &= \\ &= \frac{q_0}{m_0 c^2} \int R_{n_1 j l}^{(i)}(r) \left(\frac{E_{n_1}^{(i)} + E_{n_2}^{(j)}}{2} - U_0(r) \right) R_{n_2 j l}^{(j)}(r) r^2 dr. \end{aligned} \quad (13.70)$$

На рис. 13.2, 13.3 показаны матричные элементы $q(n_1^{(1)} = 0 | n_2^{(2)} = -0, 1, 2, 3)$ и $q(n_1^{(1)} = 1 | n_2^{(2)} = 0, 1, 2, 3)$ для s -состояний, т. е. $j = 1/2, l = 0$. Как видно из рисунков, в легких атомах глубоколежащее $0s_{1/2}^{(2)}$ -состояние слабо связано с уровнями стандартного базиса состояний. Однако в тяжелых атомах $0s_{1/2}^{(2)}$ становится связанным с состоянием $1s_{1/2}^{(1)}$ стандартного базиса. Обращаясь к рис. 12.3, мы видим, что связь наиболее велика в той области зарядов ядер, где энергии указанных уровней наиболее близки. Состояние $1s_{1/2}^{(1)}$ стандартного базиса сильно связано с состоянием $1s_{1/2}^{(2)}$ полного базиса состояний в атомах с легкими ядрами, и эта связь становится слабой в тяжелых атомах, когда разность энергий указанных двух уровней становится максимальной.

Следует напомнить, что в гл. 12 были определены собственные волновые функции краевой задачи о движении электрона в кулоновском поле, поэтому заряд ядра атома Z , фигурирующий на рис. 13.2, 13.3, представляет собой заряд ядра с нулевым спином.

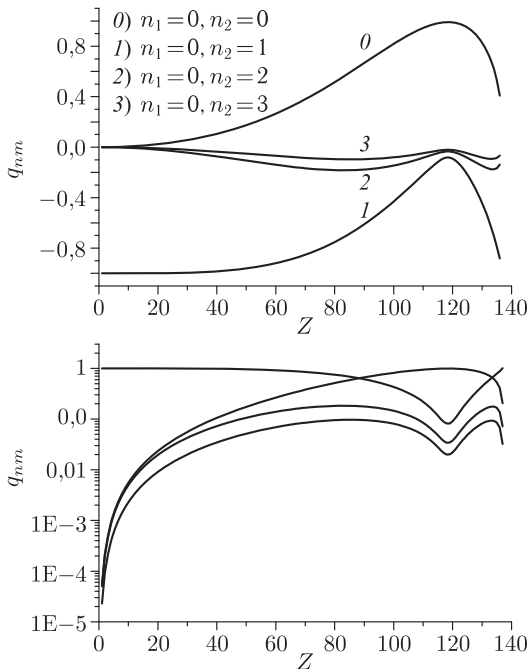


Рис. 13.2. Зависимость матричных элементов межзонных переходов $q(n_1^{(1)} = 0 | n_2^{(2)} = 0, 1, 2, 3)$ от заряда ядра атома в случае, когда начальное и конечное состояния являются s -состояниями, т. е. $j^{(1,2)} = 1/2, l^{(1,2)} = 0$

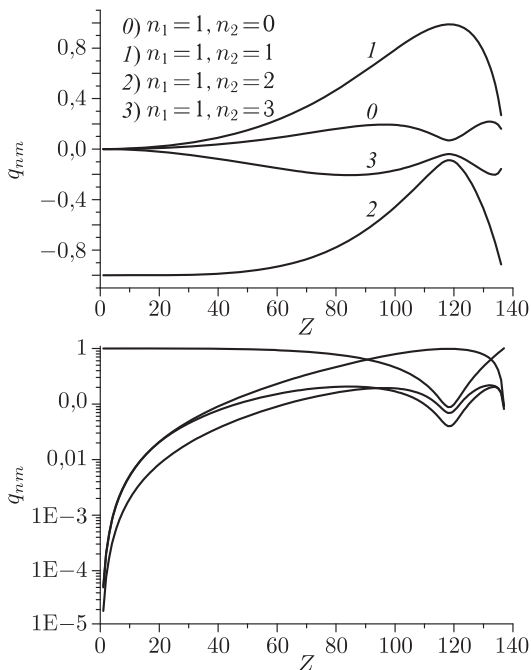


Рис. 13.3. Зависимость матричных элементов межзонных переходов $q(n_1^{(1)} = 1 | n_2^{(2)} = 0, 1, 2, 3)$ от заряда ядра атома в случае, когда начальное и конечное состояния являются s -состояниями, т. е. $j^{(1,2)} = 1/2, l^{(1,2)} = 0$

13.2.8. Переходы высокой мультипольности. Выше мы рассматривали правила отбора в длинноволновом приближении. Вне рамок указанного приближения угловые матричные элементы принимают вид

$$\mathbf{F}_{nm} = \int \Omega_{j'm'}^{(\lambda')\dagger} \mathbf{F} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Omega_{jm}^{(\lambda)} d\omega, \quad (13.71)$$

где в качестве оператора \mathbf{F} выступают операторы: $\mathbf{r}, \mathbf{l}, \boldsymbol{\sigma}, I$. Расчет матричных элементов (13.71) производится с использованием формулы

$$\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\mathbf{e}_\mathbf{k}) Y_{lm}(\mathbf{e}_\mathbf{r}), \quad (13.72)$$

где $j_l(x)$ — функции Бесселя полуцелого порядка и $\mathbf{e}_\mathbf{k} = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор. Используя формулу сложения угловых моментов, получаем

$$Y_{lm} \Omega_{j_0 m_0}^{(\lambda_0)} = \sum_{j=|j_0-\lambda_0/2-l|}^{j_0-\lambda_0/2+l} \begin{pmatrix} a_{j_0 m_0}^{(\lambda_0)} \langle j, m+m_0-1/2 | m, m_0-1/2 \rangle Y_{j, m+m_0-1/2} \\ b_{j_0 m_0}^{(\lambda_0)} \langle j, m+m_0+1/2 | m, m_0+1/2 \rangle Y_{j, m+m_0+1/2} \end{pmatrix}, \quad (13.73)$$

где $\langle jm|m_1m_2\rangle$ — коэффициенты Клебша–Гордана. Подстановка формулы (13.73) в (13.71) позволяет воспользоваться результатами приведенных выше расчетов. Правила отбора сохраняют свой вид, например $j' = j \pm 1$ или $j' = j$. Однако для 2^l -польного излучения величина j теперь меняется в пределах $|j_0 - l| \leq j \leq j_0 + l$. Следовательно, увеличение мультипольности излучения увеличивает количество конечных состояний, связанных с начальным состоянием ненулевыми матричными элементами.

Величина дипольного момента перехода в водородоподобных атомах определяется выражением $d_0 \sim |ea_B/Z|$. Как видно из (13.72), величина матричного элемента 2^l -польного перехода пропорциональна $d_0 (ka_B/Z)^l = d_0 (2\pi a_B/Z\lambda)^l$. Следовательно, вероятность спонтанного 2^l -польного перехода меньше вероятности дипольного перехода на величину $(ka_B/Z)^{2l}$.

13.3. Взаимодействие атома с излучением в резонаторе

Задача о взаимодействии отдельного атома с электромагнитным полем является частным и предельным случаем задачи о взаимодействии электромагнитного излучения с веществом. Обычно реальные системы, взаимодействующие с полем, являются многоатомными. В многоатомном случае отдельный атом взаимодействует, как правило, не только с внешним полем, но и с полем отклика, создаваемым всеми остальными атомами системы. Амплитуда такого самосогласованного поля может существенно отличаться от амплитуды внешнего поля, например, за счет того что внешнее поле поглощается атомами системы и энергия поля со временем уменьшается. Или же, наоборот, в системе могут происходить процессы индуцированного излучения, приводящие к росту энергии поля. Таким образом, многоатомные системы взаимодействуют, как правило, с самосогласованным полем.

Необходимость учета эволюции поля в процессе его взаимодействия с атомом может возникнуть и в одноатомной системе. Например, если атом помещен в резонатор. Действительно, в этом случае поле, отразившись от стенок резонатора, может снова оказаться в области, где расположен атом. Таким образом, чем меньше размеры резонатора, тем сильнее будут отличаться друг от друга процессы взаимодействия атома с полем в свободном пространстве и в резонаторе. Настоящий раздел будет посвящен, в основном, обсуждению уравнений, описывающих взаимодействие одиночного атома с полем в резонаторе.

Перейдем к рассмотрению задачи о взаимодействии одиночного атома с электромагнитным полем. Уже эта задача является чрезвычайно сложной и не имеет общего решения, пригодного во всех конкретных случаях. Действительно, характер взаимодействия атома с внешним полем существенно зависит от величины напряженности поля падаю-

щей волны. Электромагнитную волну можно назвать слабой, если напряженность ее поля сравнима с напряженностью поля тепловых источников, в качестве которых выступают окружающие атом макроскопические тела. Равновесное тепловое излучение выступает в качестве фонового излучения. Напряженность поля тепловых источников, имеющих комнатную температуру, в области видимого диапазона электромагнитного спектра невелика, поскольку число квантов в моде излучения черного тела, определяющееся распределением Планка

$$n(\omega) = 1 / [\exp(\hbar\omega/kT) - 1], \quad (13.74)$$

меньше единицы при $\hbar\omega_k > kT \cdot \ln 2$. В области видимого диапазона электромагнитного излучения $\hbar\omega = (1 - 2) \text{ эВ}$, и поскольку комнатной температуре соответствует энергия $kT = 2,5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$, то $n_k \ll 1$. В более высокочастотной области это неравенство становится еще более строгим.

Существенной чертой равновесного теплового излучения является его изотропия, поэтому наличие теплового излучения не меняет симметрии полной системы, состоящей из атома, имеющего сферически симметричный внутриатомный потенциал, и теплового электромагнитного излучения. Однако при взаимодействии атома с внешней плоской электромагнитной волной, напряженность поля которой превышает напряженность поля тепловых источников, симметрия полной системы меняется. Действительно, электромагнитная волна выделяет три неэквивалентных направления в пространстве, которые связаны с направлениями ее волнового вектора и векторами напряженности электрического и магнитного полей. И даже в длинноволновом приближении $a_B \ll \lambda$ (где a_B — радиус боровской орбиты и λ — длина волны излучения) вместо сферической симметрии свободного водородоподобного атома мы получаем аксиальную симметрию полной системы «атом водорода + внешнее электромагнитное поле $\mathbf{A}(t)$ ». Поэтому спектр отклика атома, взаимодействующего с электромагнитным полем, энергетическое распределение которого определяется формулой (13.74), но все компоненты ω_k имеют одинаковое направление распространения, будет отличаться от спектра спонтанного излучения. Если все компоненты спектра имеют к тому же и одинаковую поляризацию, то спектр отклика атома будет испытывать дальнейшие изменения.

13.3.1. Уравнения взаимодействия атома с полем в резонаторе.

Поле в резонаторе с идеально отражающими стенками можно представить в виде разложения по собственным модам резонатора:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}} \left[A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) + A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(t) \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(\mathbf{r}) \right], \quad (13.75)$$

где V — объем резонатора, а $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r})$ являются собственными решениями краевой задачи

$$\Delta \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = 0$$

с граничными условиями, определяющими равенство нулю тангенциальной компоненты вектора напряженности электрического поля на стенках резонатора. Например, в случае когда резонатор имеет вид прямоугольного параллелепипеда объема $V = L_1 L_2 L_3$, имеющего идеально отражающие стенки, собственные функции $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ представляют собой суперпозицию стоячих плоских волн с волновыми векторами

$$\mathbf{k}_n = \pi \left(\mathbf{e}_1 \frac{n_1}{L_1} + \mathbf{e}_2 \frac{n_2}{L_2} + \mathbf{e}_3 \frac{n_3}{L_3} \right), \quad (13.76)$$

где n_i — произвольные целые числа, а \mathbf{e}_i — система единичных ортогональных векторов. Собственные решения удовлетворяют условиям полноты и ортонормированности:

$$\frac{1}{V} \int_V \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(\mathbf{r}) \mathbf{u}_{\mathbf{k}'}^{(\beta)}(\mathbf{r}) dV = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\beta}.$$

В пустом резонаторе амплитуды $A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t)$ гармонически осциллируют во времени:

$$A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) = a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \exp(-i\omega_{\mathbf{k}} t),$$

где $\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|c$, и для векторов напряженности электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{B} полей получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}V}} & \left[i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega_{\mathbf{k}} t) - \right. \\ & \left. - i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(\mathbf{r}) \exp(i\omega_{\mathbf{k}} t) \right], \\ \mathbf{B} = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}V}} & \left[a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \text{rot } \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega_{\mathbf{k}} t) + \right. \\ & \left. + a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \text{rot } \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(\mathbf{r}) \exp(i\omega_{\mathbf{k}} t) \right]. \end{aligned}$$

Для энергии поля в резонаторе, усредненной по периоду межмодовых колебаний T , используя вышеприведенные выражения, получаем

$$W = \frac{1}{T} \int_0^T \int_V w(\mathbf{r}, t) dV dt = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}. \quad (13.77)$$

Таким образом, нормировка, принятая в разложении (13.75), соответствует тому, что амплитуды $A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ являются безразмерными амплитудами векторного потенциала и имеют простой физический смысл, состоящий в том, что квадрат модуля амплитуды $|A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}|^2 = |a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}|^2$ определяет

число квантов поля в (\mathbf{k}, α) моде резонатора. При этом нормировочный множитель

$$A_0(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}V}} \quad (13.78)$$

определяет амплитуду одноквантового поля, т.е. амплитуду векторного потенциала в (\mathbf{k}, α) моде резонатора в случае, когда число заполнения этой моды равно единице: $|a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}|^2 = 1$.

Система самосогласованных уравнений взаимодействия атома с полем в резонаторе состоит из уравнения для электромагнитного поля,

$$\Delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t), \quad (13.79)$$

где

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n,m} a_n^*(t) a_m(t) \mathbf{j}_{nm},$$

и уравнений для амплитуд населенности атомных состояний:

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_m V_{nm} a_m(t). \quad (13.80)$$

Вычисления, проведенные в предыдущем разделе, показали, что наибольшую величину имеют матричные элементы электрического дипольного момента, обусловленные трансляционным движением частицы, поэтому положим

$$\mathbf{j}_{nm} = \frac{\partial \mathbf{P}_{nm}}{\partial t} = i\omega_{nm} \mathbf{r} \rho_{nm},$$

где

$$\rho_{nm}(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{m_0 c^2} \bar{\Psi}_n(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(r) \right) \Psi_m(\mathbf{r}) \exp(i\omega_{nm}t).$$

Подставляя разложение (13.75) в (13.79), получаем

$$\frac{d^2 A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}}{dt^2} + k^2 c^2 A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} = 2i \sqrt{\frac{2\pi\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar V}} \sum_{n,m} \omega_{nm} b_n^* b_m \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{r} \rho_{nm}(\mathbf{r}) dV \exp(i\omega_{nm}t). \quad (13.81)$$

Для удобства дальнейшего изложения мы обозначили амплитуды населенности атомных уровней $b_n(t)$. Положим, что одна из резонаторных мод поля наиболее близка к частоте дипольно разрешенного перехода между двумя уровнями атома:

$$\omega_{\mathbf{k}} \approx \omega_{21}, \quad (13.82)$$

и далека от частот других переходов. В этом случае будет изменяться лишь населенность указанных двух уровней атома и мы можем воспользоваться двухуровневой моделью атома. Тогда в выражении (13.28) мы можем оставить лишь первое слагаемое, опустив в нем поляризацию $\mathbf{P}^{(s)}$, обусловленную наличием внутренних степеней сво-

боды электрона, поскольку, как показывают оценки (13.58), поправки, вносимые $\mathbf{P}^{(s)}$, незначительны. Для амплитуд населенности указанных двух уровней в этом случае получаем

$$\frac{db_2}{dt} = - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar V}} \left[\int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{r} \rho_{21}(\mathbf{r}) dV A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) - \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \mathbf{r} \rho_{21}(\mathbf{r}) dV A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(t) \right] b_1 \exp(i\omega_{21}t), \quad (13.83)$$

$$\frac{db_1}{dt} = - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar V}} \left[\int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{r} \rho_{12}(\mathbf{r}) dV A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) - \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \mathbf{r} \rho_{12}(\mathbf{r}) dV A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(t) \right] b_2 \exp(-i\omega_{21}t).$$

Запишем амплитуду $A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t)$ в следующем виде:

$$A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) = a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) \exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t).$$

В силу условия (13.82) амплитуды $a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t)$ являются медленно меняющимися, т. е. удовлетворяют условию

$$\left| \frac{da_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}}{dt} \right| \approx \left| \Delta\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right| \ll \omega_{\mathbf{k}} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right|, \quad (13.84)$$

где $\Delta\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21}$. Используя условия (13.82) и (13.84), систему уравнений (13.81) и (13.83) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{da_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}}{dt} &= \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} b_1^* b_2 \exp(i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t), \\ \frac{db_2}{dt} &= - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} b_1 \exp(-i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t), \\ \frac{db_1}{dt} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} b_2 \exp(i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t), \end{aligned} \quad (13.85)$$

где

$$\nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} = \sqrt{\frac{2\pi\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar V}} d_{21}^{(\alpha)}$$

и

$$d_{21}^{(\alpha)} = \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{r} \rho_{21}(\mathbf{r}) dV.$$

Отметим, что в длинноволновом приближении

$$d_{21}^{(\alpha)} = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \int \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{r} \rho_{21}(\mathbf{r}) dV,$$

где \mathbf{r}_0 — радиус-вектор ядра атома.

13.3.2. Многоатомная сосредоточенная система. Систему уравнений (13.85) можно обобщить и на случай, когда в резонаторе находится не один атом, а ансамбль N двухуровневых атомов. Система уравнений, описывающих взаимодействие ансамбля двухуровневых атомов с полем в резонаторе, имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{dA_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}}{dt} &= \sum_{i=1}^N \nu_{\mathbf{k},i}^{(\alpha)*} b_{1i}^*(t) b_{2i}(t) \exp(i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t), \\ \frac{db_{2i}}{dt} &= - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k},i}^{(\alpha)} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) b_{1i}(t) \exp(-i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t), \\ \frac{db_{1i}}{dt} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k},i}^{(\alpha)*} A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*}(t) b_{2i}(t) \exp(i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t),\end{aligned}\quad (13.86)$$

где $b_{1,2i}$ — амплитуды населенности уровней 1, 2 i -го атома. Как видно, система уравнений (13.86) содержит $2N$ уравнений для атомных переменных.

Пусть многоатомная система занимает объем, размеры которого много меньше длины волны излучения. Тогда можно положить, что

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_i) \approx \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0),$$

где \mathbf{r}_0 — координата центра масс атомного ансамбля. В случае когда атомы ансамбля являются полностью идентичными, т.е. $\mathbf{d}_{21}^{(i)} = \mathbf{d}_{21}$, мы получаем, что $b_{1i} = b_1$ и $b_{2i} = b_2$, и система уравнений (13.86) принимает вид

$$\begin{aligned}\frac{da_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}}{dt} &= \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} b_1^* b_2 \exp(i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t), \\ \frac{db_2}{dt} &= - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} b_1 \exp(-i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t), \\ \frac{db_1}{dt} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} b_2 \exp(i\Delta\omega_{\mathbf{k}}t),\end{aligned}\quad (13.87)$$

где

$$a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} = A_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} / \sqrt{N} \quad (13.88)$$

и параметры $\nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ определяются следующим выражением:

$$\nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} = \sqrt{\frac{2\pi\omega_{\mathbf{k}}N}{\hbar V}} d_{21}^{(\alpha)}.$$

Система уравнений (13.87) совпадает по виду с системой уравнений (13.85) для одного атома. Однако есть и существенное отличие между этими системами уравнений, состоящее в том, что амплитуда поля $a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$, входящая в систему уравнений (13.87), нормирована условием (13.88), т.е. она равна единице, когда число квантов в моде (\mathbf{k}, α) резонатора равно числу атомов ансамбля. Амплитуда одноквантового

поля при этом становится равной $A_0(\mathbf{k})/\sqrt{N}$. Однако произведение $\nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ остается таким же, как и в случае одного атома.

13.3.3. Спонтанный распад в свободном пространстве. Радиационные переходы в атоме обусловлены взаимодействием атома с тепловым равновесным излучением, создаваемым окружением. Наличие идеально отражающих стенок меняет пространственное распределение теплового излучения в объеме резонатора, что приводит к различиям скоростей распада атома в свободном пространстве и в резонаторе. Наличие идеально отражающих стенок приводит также и к тому, что электромагнитное излучение, ввиду конечной скорости его распространения, не покидает пределов области взаимодействия и может влиять на процесс радиационного распада атома. В видимом диапазоне спектра излучения конечность времени запаздывания может проявляться уже при макроскопических размерах резонатора, а существенные изменения в пространственной структуре поля в резонаторе проявляются тогда, когда размеры резонатора становятся сравними с длиной волны излучения. Естественно, что интерференционная структура поля в резонаторе проявляется лишь тогда, когда скорость теплового движения невелика, так чтобы за время радиационного перехода атом перемещался на расстояние, много меньшее длины волны излучения.

Система уравнений (13.85) имеет следующие интегралы движения:

$$|b_2(t)|^2 + |b_1(t)|^2 = 1, \quad (13.89a)$$

$$\sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) \right|^2 + |b_2(t)|^2 = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(0) \right|^2 + |b_2(0)|^2, \quad (13.89б)$$

$$\sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) \right|^2 - |b_1(t)|^2 = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(0) \right|^2 - |b_1(0)|^2. \quad (13.89в)$$

Выражение (13.89a) представляет собой следствие условия полноты системы собственных состояний двухуровневого атома, а выражения (13.89б, в) определяют закон сохранения энергии полной системы, включающей атом и поле в резонаторе. Действительно, из (13.89б, в) получаем

$$\sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t) \right|^2 - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(0) \right|^2 = \frac{1}{2} \left(|b_2(0)|^2 - |b_1(0)|^2 \right) - \frac{1}{2} \left(|b_2(t)|^2 - |b_1(t)|^2 \right).$$

Если в резонатор помещен атом, находящийся в возбужденном состоянии, то $|b_2(0)|^2 = 1$ и $|b_1(0)|^2 = 0$. Следовательно, в результате радиационного распада атома число заполнения мод резонатора увеличивается на единицу:

$$\sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(t \rightarrow \infty) \right|^2 - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}(0) \right|^2 = 1. \quad (13.90)$$

Оценим количество резонаторных мод, эффективно участвующих в процессе радиационного распада атома в резонаторе. Как следует из (13.85), характерная скорость изменения населенности уровней атома определяется величиной

$$\sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} = \frac{1}{\hbar c} \sum_{\mathbf{k}\alpha} d_{21}^{(\alpha)} \omega_{\mathbf{k}} A_0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}.$$

Поскольку в результате радиационного распада атома число заполнения мод увеличивается на единицу, то можно положить

$$\sum_{\mathbf{k}\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} = \frac{d_{21} E_0}{\hbar}, \quad (13.91)$$

где $E_0 = \omega_{\mathbf{k}} A_0 / c$ — амплитуда вектора электрической напряженности одноквантового поля в резонаторе (см. (13.78)). Таким образом, атом эффективно взаимодействует лишь с теми модами резонатора, частоты которых лежат в следующих пределах вблизи частоты атомного перехода:

$$\left| \frac{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21}}{\omega_{21}} \right| \leq \frac{d_{21} E_0}{\hbar \omega_{21}}. \quad (13.92)$$

Величина, стоящая в правой части неравенства (13.92), равна отношению энергии электродипольного взаимодействия атома с одноквантовым полем в резонаторе к энергии кванта поля. Поскольку амплитуда одноквантового поля обратно пропорциональна корню квадратному из объема, то с уменьшением объема резонатора амплитуда одноквантового поля растет. Оценим величину напряженности электрического поля E_0 , соответствующую одноквантовому полю в резонаторе:

$$E_0 = \frac{\omega}{c} A_0 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}}.$$

Положим, что объем резонатора равен кубу длины волны: $V = \lambda^3$. Учитывая технологические трудности в изготовлении резонаторов субмикронного размера, более реалистично положить, что размеры резонатора составляют десятки микрон. В этом случае $\omega \leq 10^{14}$ Гц получаем

$$E_0 = \frac{\omega^2}{2\pi c} \sqrt{\frac{\hbar}{c}} \approx 1 \text{ В/см.}$$

Мы видим, что в микрорезонаторе величина E_0 достаточно велика. Действительно, полагая, что дипольный момент оптического перехода атома равен $d_0 = 1$ Дебай, для энергии электродипольного взаимодействия получаем: $d_0 E_0 \leq 0,001$ эВ. Следовательно, в микрорезонаторах $\Delta\omega/\omega \leq 10^{-2}$. Однако с уменьшением размеров резонатора растет и межмодовое расстояние $\Delta\omega_0 \approx \pi c/L$, поэтому количество взаимодействующих мод мало. В резонаторах макроскопического размера амплитуда одноквантового поля падает, однако одновременно уменьшается и межмодовое расстояние.

Выражение (13.91) определяет связь коэффициентов $\nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ с напряженностью одноквантового поля резонатора. Полезно также определить связь этих коэффициентов с временем спонтанного распада T_1 и числом мод, эффективно участвующих в радиационном распаде атома. Под временем спонтанного распада традиционно понимают величину, обратную скорости спонтанного распада атома в свободном пространстве, т. е. в резонаторе бесконечно большого размера. Решение уравнения (13.79) для электромагнитного поля имеет в общем случае вид

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{j}(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}) dV', \quad (13.93)$$

где $\mathbf{A}_0(\mathbf{r}, t)$ — решение однородного уравнения

$$\Delta \mathbf{A}_0(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0.$$

Таким образом, первое слагаемое в (13.93) представляет собой векторный потенциал свободного равновесного поперечного электромагнитного поля, а второе — векторный потенциал поля, обусловленного движением населенности уровней атома. Следовательно, число заполнения мод резонатора определяется как амплитудой равновесного поля, так и амплитудой поля излучения атома. В соответствии с законом сохранения энергии (13.90) суммарное число заполнения мод резонатора при радиационном распаде атома изменяется на единицу, поэтому число заполнения отдельной моды резонатора излучением атома можно оценить как $|a_{1\mathbf{k}}^{(\alpha)}|^2 \approx 1/N$, где N — число мод, участвующих в радиационном распаде атома в резонаторе. Поскольку межмодовое расстояние при $L \rightarrow \infty$ стремится к нулю, то число мод N стремится к бесконечности. С другой стороны, число заполнения мод резонатора равновесным тепловым излучением $|a_{0\mathbf{k}}^{(\alpha)}|^2$ определяется выражением (13.74). Следовательно, $|a_{0\mathbf{k}}^{(\alpha)}| \gg |a_{1\mathbf{k}}^{(\alpha)}|$ при $L \rightarrow \infty$, поэтому радиационный распад в свободном пространстве определяется, в основном, амплитудой равновесного поля. Это понятно и из общих соображений: в резонаторе бесконечно большого размера, ввиду большого времени запаздывания, отраженная от стенок резонатора волна не влияет на радиационный распад атома, поэтому суперпозиция резонаторных мод $a_{1\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ в этом случае описывает расходящуюся от атома волну.

Следуя вычислениям, проведенным в разделе 6.2.2, из последних двух уравнений системы (13.85) получаем

$$\frac{d|a_2|^2}{dt} = -2 \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} a_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right|^2 \frac{\sin(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21})t}{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21}} |a_2(t)|^2. \quad (13.94)$$

В силу вышесказанного очевидно, что в этом случае можно не учитывать первое уравнение системы уравнений (13.85), а провести расчеты, используя выражение (13.90). Учтем также, что функция $\sin(\Delta t)/\Delta$ при $t \rightarrow \infty$ близка к δ -функции, а интеграл от нее имеет величину

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(\Delta t)}{\Delta} d\Delta = \pi,$$

скорость спонтанного распада можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_1} &= \frac{\pi}{4} \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \sum_{\alpha} \int \left| \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21}) d\mathbf{k} = \\ &= \frac{\omega_{21}^3}{2\pi\hbar c^3} \int \sum_{\alpha} \left| d_{21}^{(\alpha)} \right|^2 do = \frac{4\omega_{21}^3 |\mathbf{d}_{21}|^2}{3\hbar c^3}. \end{aligned} \quad (13.95)$$

При интегрировании по угловым переменным мы воспользовались формулой

$$\sum_{\alpha} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \mathbf{d}_{21} \right) \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)*} \mathbf{d}_{21}^* \right) = (\mathbf{d}_{21}^* \mathbf{d}_{21}) - (\mathbf{n} \mathbf{d}_{21}) (\mathbf{n} \mathbf{d}_{21}^*),$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ и $\mathbf{d}_{21} = \int \mathbf{r} \rho_{21}(\mathbf{r}) dV$.

С другой стороны, выражение (13.95) можно записать в следующем виде:

$$\frac{1}{T_1} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left| \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{21}) = \frac{\pi}{4} |\nu_0|^2 \frac{N}{\Delta\omega_0}, \quad (13.96)$$

где N — число слагаемых в сумме по (\mathbf{k}, α) , $\Delta\omega_0 = \Delta k \cdot c = \pi c/L$ — межмодовое расстояние в резонаторе, а

$$|\nu_0|^2 = \frac{1}{4\pi} \int \sum_{\alpha} \left| \nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \right|^2 do = \frac{4\pi\omega_{21} |\mathbf{d}_{21}|^2}{3\hbar V}. \quad (13.97)$$

Отметим, что множитель $1/8$ в правой части (13.95) появился в результате того, что суммирование в (13.94) ведется по положительным проекциям вектора \mathbf{k} , а интегрирование в (13.95) — по всему пространству. Из этих же соображений указанный множитель введен и в правую часть выражения (13.96). Число N мод поля, вносящих вклад в спонтанный распад атома, определяется следующим образом. Спонтанному распаду соответствует радиационный переход в резонаторе бесконечного объема $L_i \rightarrow \infty$, поэтому, не ограничивая общности, в (13.76) можно положить: $L_i = L$. Как следует из (13.96), вклад в сумму по \mathbf{k} дают только те узлы обратного пространства, для которых $|\mathbf{k}_n| = \omega_{21}/c$, т. е. узлы обратного пространства, лежащие на сфере радиуса ω_{21}/c . При $\omega_{21}/c \gg \pi/L$ число таких узлов можно оценить как

отношение поверхности сферы $S = 4\pi (\omega_{21}/c)^2$ к площади основания элементарной ячейки $\Delta S = (\pi/L)^2$. Следовательно,

$$N \approx S/\Delta S = \frac{4}{\pi} \left(\frac{\omega_{21}L}{c} \right)^2. \quad (13.98)$$

Действительно, подставляя в (13.96) выражения (13.97) и (13.98), снова получаем формулу (13.95).

Таким образом, соотношение (13.96) определяет связь между характерной величиной параметров $\nu_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$, скоростью спонтанного распада $1/T_1$ и числом N мод, участвующих в спонтанном распаде. Число мод резонатора, принимающих участие в спонтанном распаде, квадратично зависит от размеров резонатора. Уменьшение размеров резонатора приводит к возрастанию амплитуды одноквантового поля и увеличению межмодового расстояния. Одновременно с этим в резонаторе конечных размеров становится существенным учет поля, отраженного от стенок резонатора, которое начинает влиять на динамику радиационного распада атома в резонаторе.

13.3.4. Радиационные процессы в одномодовом резонаторе.

Как мы показали выше, число резонаторных мод поля, взаимодействующих с атомом, определяется условием (13.92). Межмодовое расстояние увеличивается с уменьшением размеров резонатора, поэтому, выбирая геометрию резонатора, при небольших его размерах (т.е. размерах, сопоставимых с длиной волны излучения хотя бы по одному или двум направлениям), мы можем реализовать ситуацию, когда атом взаимодействует лишь с одной модой поля. В этом случае системы уравнений (13.85) и (13.87) принимают вид

$$\begin{aligned} \dot{a} &= \nu b_1^* b_2 \exp(i\Delta\omega t), \\ \dot{b}_2 &= -\nu b_1 a \exp(-i\Delta\omega t), \\ \dot{b}_1 &= \nu b_2 a^* \exp(i\Delta\omega t). \end{aligned} \quad (13.99)$$

Система уравнений (13.99) обладает важным свойством, заключающимся в том, что скорости изменения всех амплитуд пропорциональны параметру ν . Следовательно, при проведении расчетов мы можем не обращать внимания на численное значение этого параметра, поскольку полученные зависимости могут быть легко пересчитаны на произвольное значение параметра ν масштабным изменением интервала, на котором произведен расчет.

Система уравнений (13.99) имеет следующие интегралы движения, являющиеся частным случаем выражений (13.89а–в):

$$\begin{aligned} |b_1(t)|^2 + |b_2(t)|^2 &= 1, \\ |a(t)|^2 - |b_1(t)|^2 &= C_1, \\ |a(t)|^2 + |b_2(t)|^2 &= C_2, \end{aligned} \quad (13.100)$$

где C_1 и C_2 — константы, удовлетворяющие равенству $C_2 - C_1 = 1$. Запишем амплитуды $b_{1,2}$ и a в виде

$$\begin{aligned} b_1(t) &= B_1(t) \exp[i\varphi_1(t)], & b_2(t) &= B_2(t) \exp[i\varphi_2(t)], \\ a(t) &= A(t) \exp[i\psi(t)]. \end{aligned}$$

После подстановки этих выражений система уравнений (13.99) принимает вид

$$\begin{aligned} \dot{B}_1 &= \nu B_2 A \cos \Phi, & \dot{\varphi}_1 B_1 &= \nu B_2 A \sin \Phi, \\ \dot{B}_2 &= -\nu B_1 A \cos \Phi, & \dot{\varphi}_2 B_2 &= \nu B_1 A \sin \Phi, \\ \dot{A} &= \nu B_2 B_1 \cos \Phi, & \dot{\psi} A &= \nu B_2 B_1 \sin \Phi, \end{aligned} \quad (13.101)$$

где $\Phi = \Delta\omega t + \varphi_2 - \varphi_1 - \psi$.

Из последней системы уравнений видно, что наряду с интегралами движения (13.100) имеют место следующие интегралы движения:

$$\dot{\varphi}_1 B_1^2 = \dot{\varphi}_2 B_2^2 = \dot{\psi} A^2. \quad (13.102)$$

В гамильтоновой трактовке, которую мы обсудим позже, эти интегралы движения имеют смысл законов сохранения углового момента.

Исследуем динамику радиационного распада полностью возбужденной в начальный момент атомной системы: $a(-\infty) = 0$, $b_1(-\infty) = 0$, $|b_2(-\infty)| = 1$. В этом случае $C_1 = 0$, а $C_2 = 1$. Учитывая первое из соотношений (13.100), амплитуды $B_{1,2}$ можно представить в виде

$$B_1(t) = \sin \theta(t), \quad B_2(t) = \cos \theta(t). \quad (13.103)$$

Из второго соотношения (13.100) в этом случае получаем

$$A(t) = \sin \theta(t). \quad (13.104)$$

Подставляя (13.103) и (13.104) в (13.102), окончательно получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{dt} &= \Delta + \nu \cos \Phi \left(\frac{1}{\cos \theta} - 3 \cos \theta \right), \\ \frac{d\theta}{dt} &= -\nu \sin \theta \sin \Phi. \end{aligned} \quad (13.105)$$

В случае точного резонанса, $\Delta\omega = 0$, система уравнений (13.105) имеет следующее решение:

$$\Phi(t) = \pi/2, \quad \theta(t) = 2 \arctg[\exp(\nu t)].$$

Следовательно, амплитуда поля $A(t)$ имеет вид

$$A(t) = \frac{1}{\operatorname{ch}(\nu t)}, \quad (13.106)$$

а населенность верхнего (изначально возбужденного $n_2(t = -\infty) = 1$) уровня меняется во времени по следующему закону:

$$n_2(t) = \operatorname{th}^2(\nu t). \quad (13.107)$$

Отметим, что одним из точных решений системы уравнений (13.99) является следующее: $a(t) = 0$, $b_2(t) = c_2$, $b_1(t) = c_1$ (где $c_{1,2}$ — константы), поэтому задание начальных условий в виде $a(0) = 0$, $b_2(0) = c_2$, $b_1(0) = c_1$ не приведет к какой-либо динамике атомно-полевых переменных. Следовательно, в отсутствие равновесного теплового излучения, т. е. при $\mathbf{A}_0 = 0$ в (13.93), возбужденный атом будет бесконечно долго находиться в возбужденном состоянии. Для стимулирования радиационного распада возбужденного атома в микрорезонаторе необходимо, чтобы число заполнения резонансной моды резонатора равновесным излучением было как угодно мало, но отлично от нуля. Поэтому в общем случае вместо (13.104) из второго соотношения (13.100) получаем

$$A(t) = \sqrt{A_0^2 + \sin^2 \theta(t)},$$

где $A_0 = A(t=0)$ — амплитуда равновесного поля в резонаторе. При $\Delta\omega = 0$ решение системы уравнений (13.99) выражается через эллиптические функции:

$$\frac{1}{\sqrt{1 + A_0^2}} \left[F\left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{1 + A_0^2}\right) - F\left(\frac{\pi}{2} - \theta, \frac{1}{1 + A_0^2}\right) \right] = \nu t. \quad (13.108)$$

Пример динамики полевых и атомных переменных для случаев $A_0^2 = 1/100$, $1/1000$ показан на рис. 13.4. На рисунке показан временной профиль квадрата амплитуды поля $|a(t)|^2$ (рис. 13.4, *а, в*) и населенности нижнего уровня (рис. 13.4, *б, г*). В соответствии со сказанным выше при расчетах мы положили $\nu = 1$. Это означает, что безразмерное время по оси абсцисс измеряется в единицах νt . Из рисунка видно, что равновесное поле стимулирует распад возбужденного состояния атома, а затем происходит периодическая перекачка энергии возбуждения от атома к полю и обратно. Форма каждого импульса поля хорошо описывается формулой (13.106), а период их следования определяется величиной A_0 . Из рисунка видно, что динамика эволюции состояния возбужденного атома в одномодовом идеальном микрорезонаторе качественно отличается от динамики эволюции возбужденного атома в свободном пространстве. Атом большее время проводит в возбужденном состоянии, а не в основном.

На рис. 13.5 показана динамика населенности верхнего атомного уровня при радиационном распаде в резонаторе изначально возбужденного атома в случае, когда частота моды резонатора $\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|c$ отстроена от частоты атомного перехода. Величина отстройки равна $(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})/\nu = 0$ (*а*), 1,0 (*б*), 1,5 (*в*) и $A_0^2 = 1/100$. Из рисунка видно, что с ростом отстройки (в особенности, при $\Delta\omega > \nu$) период осцилляций населенности увеличивается, а вероятность нахождения атома в возбужденном состоянии растет.

Итак, мы видим, что поведение консервативной системы, состоящей из атома и одномодового поля излучения, качественно отличается

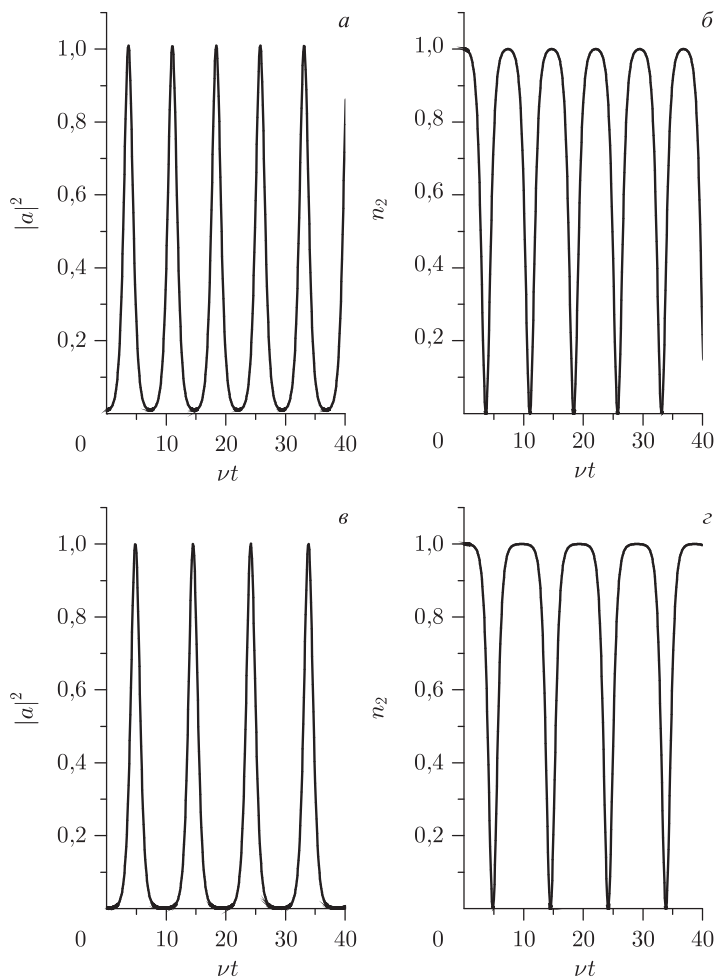


Рис. 13.4. Динамика амплитуды поля в резонаторе $|a(t)|^2$ (а, в) и населенности верхнего атомного уровня $n_2(t) = |b_2(t)|^2$ (б, г) для значений амплитуды равновесного поля в резонаторе $A_0^2 = 1/100$ (а и б), $1/1000$ (в и г)

от поведения атома, взаимодействующего с бесконечным числом мод равновесного электромагнитного поля свободного пространства.

13.3.5. Радиационный распад в многомодовом резонаторе.

Качественные различия в характере взаимодействия атома с одномодовым и многомодовым электромагнитными полями могут быть продемонстрированы уже на примере одномерной модели. Положим, что резонатор имеет вытянутую, например цилиндрическую, форму и поперечные размеры близки к длине волны излучения атома, а продольная длина

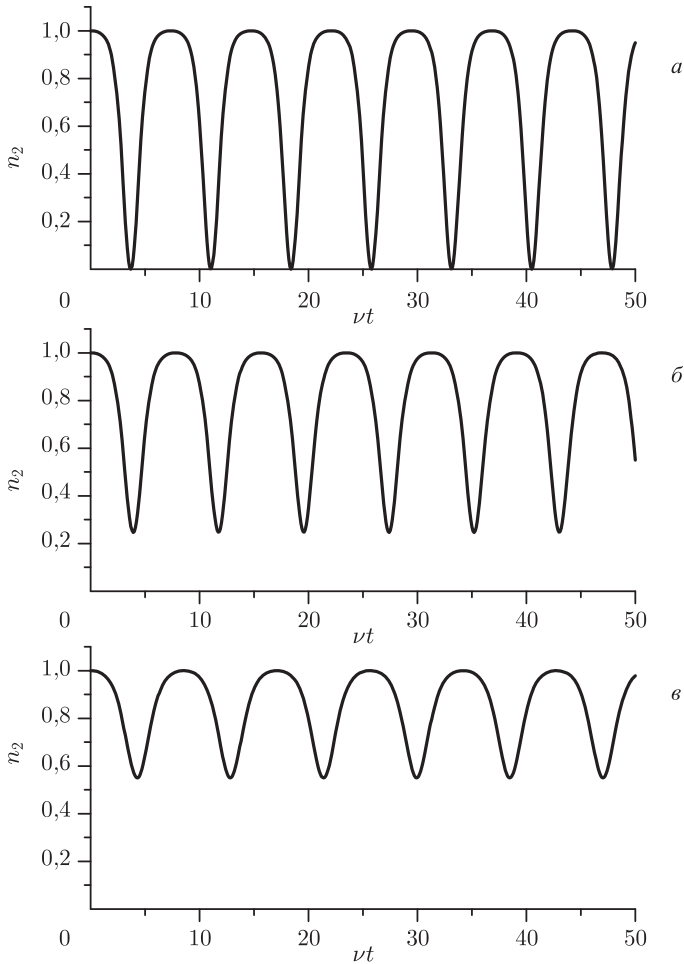


Рис. 13.5. Динамика населенности верхнего атомного уровня при радиационном распаде в резонаторе изначально возбужденного атома для различных значений отстройки частоты поля от частоты атомного перехода: $(\omega_0 - \omega_k) / \nu = 0$ (а), 1,0 (б), 1,5 (в). Амплитуды равновесного поля в резонаторе $A_0^2 = 1/100$

много больше длины волны излучения. В этом случае возбуждается лишь одна поперечная мода поля и систему уравнений (13.85) можно записать в виде

$$\begin{aligned}
 \dot{a}_n + i\Delta\omega_n a_n &= \nu_n b_2 b_1^*, \\
 \dot{b}_2 &= -\sum_n \nu_n a_n b_1, \\
 \dot{b}_1 &= \sum_n \nu_n^* a_n^* b_2,
 \end{aligned}
 \tag{13.109}$$

где $\mathbf{k}_n = \mathbf{k}_\perp + \mathbf{e}_z \pi n / L$ и мы опустили индекс поляризации. В (13.109) мы ввели амплитуду поля $a'_n = a_n \exp(-i\Delta\omega_n t)$, однако штрихи здесь и далее будем опускать.

Особенности взаимодействия атома с полем в многомодовом резонаторе обусловлены спецификой временной структуры поля в точке расположения атома. Интегральное поле в любой точке резонатора имеет вид

$$a(t) = \sum_{m=-M/2}^{M/2} A_m(t) \exp(i\Delta\omega_m t), \quad (13.110)$$

где M — число резонаторных мод, принимающих участие во взаимодействии с атомом. Если моды эквидистантны, то

$$\Delta\omega_m = m\Delta\omega_0.$$

В случае когда амплитуды $A_n(t)$ некоррелированы, т. е. тогда, когда амплитуда равновесного поля значительно превышает амплитуду поля, обусловленного движением населенности уровней атома, можно считать, что каждая мода взаимодействует с атомом независимо. Однако амплитуды мод поля, обусловленного движением населенности уровней атома, являются коррелированными, поскольку все они определяются вторым слагаемым в (13.93). Полагая, что в пределах ширины атомного перехода все амплитуды одинаковы: $A_n(t) = A_0(t)$, из (13.110) получаем

$$a(t) = A_0(t) \frac{\sin(M\Delta\omega_0 t/2)}{\sin(\Delta\omega_0 t/2)}. \quad (13.111)$$

Таким образом, мы видим, что амплитуда интегрального поля в резонаторе достигает максимума в моменты времени, удовлетворяющие условию

$$t_N = 2\pi N / \Delta\omega_0,$$

где N — целое число. В эти моменты времени отдельные моды резонатора оказываются сфазированными друг с другом (т. е. их фазы отличаются на величину, кратную 2π) и максимальное значение амплитуды интегрального поля оказывается пропорциональным числу мод с которыми атом взаимодействует

$$a_{\max}(t = t_N) = M \cdot A_0(t_N).$$

В (13.111) следует, что длительность сфазированного состояния интегрального поля (или длительность времени расфазировки) обратно пропорциональна числу мод M .

Как мы видели выше, величина $\sum_m |a_m(t)|^2 - \sum_m |a_m(0)|^2$ согласно (13.90) равна единице. С другой стороны, в многомодовом случае амплитуда суммарного поля в любой точке резонатора определяется выражением

$$a(t) = \sum_m a_m(t).$$

Как видно, интенсивность суммарного поля

$$|a(t)|^2 = \left| \sum_m a_m(t) \right|^2$$

в многомодовом случае может превышать суммарное число квантов поля $n = \sum_m |a_m(t)|^2$. Например, четыре сфазированные моды с одинаковыми амплитудами $a_0 = 0,5$ имеют суммарную амплитуду $a = 4a_0 = 4 \times 0,5 = 2$ и интенсивность суммарного поля $2^2 = 4$. С другой стороны, суммарное число квантов поля равно $n = 0,25 \cdot 4 = 1$. Это связано с тем, что термин «квант света», понимаемый через определение энергии поля в виде $E = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar\omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$, описывает лишь усредненные по времени характеристики поля. Как мы видим, динамика взаимодействия атома с полем в многомодовом резонаторе определяется интерференцией когерентно возбуждаемых мод поля резонатора. Скорость радиационного распада определяется числом заполнения мод резонатора только тогда, когда амплитуда некогерентного равновесного поля превышает амплитуду когерентно возбуждаемых мод, т. е. при распаде атома в свободном пространстве.

Динамика полевых и атомных переменных при радиационном распаде атомного ансамбля в многомодовом резонаторе с межмодовым расстоянием $\Delta = \Delta\omega_0 \cdot T = \nu$ показана на рис. 13.6. В этом случае заметные значения имеют амплитуды девяти мод: центральной $\omega_0 = \omega_{21}$ и восьми боковых: $\omega_n = \omega_0 \pm \Delta\omega \cdot n$, где $n = 1, 2, 3, 4$. На рисунке показана динамика интегральной интенсивности поля в резонаторе $\left| \sum_n a_n(t) \right|^2$ (а), интенсивности центральной компоненты $|a_0(t)|^2$ (б), населенности нижнего (е) и верхнего (з) атомных уровней. Сравнивая рис. 13.6 с рис. 13.4 и 13.5, мы видим, что если в одномодовом резонаторе атом находится большее время в возбужденном состоянии, то в многомодовом резонаторе атом большее время проводит в основном состоянии. Такое поведение атома целиком обусловлено структурой поля в многомодовом резонаторе, о которой мы говорили выше. Действительно, мы видим, что сразу после радиационного распада атома интенсивность интегрального поля в резонаторе становится малой в результате деструктивной интерференции мод поля (рис. 13.6, а), несмотря на то что амплитуды отдельных мод поля при этом максимальны (рис. 13.6, б). Однако через интервал времени $\Delta t = 2\pi/\Delta\omega$ после радиационного распада резонаторные моды фазированы и амплитуда интегрального поля возрастает. В этот момент происходит интенсивное взаимодействие атома с внутррезонаторным полем и атом переходит в возбужденное состояние. Далее процесс периодически повторяется.

Итак, сравнивая эволюцию атомного ансамбля в одномодовом и многомодовом резонаторах, мы приходим к весьма интересному

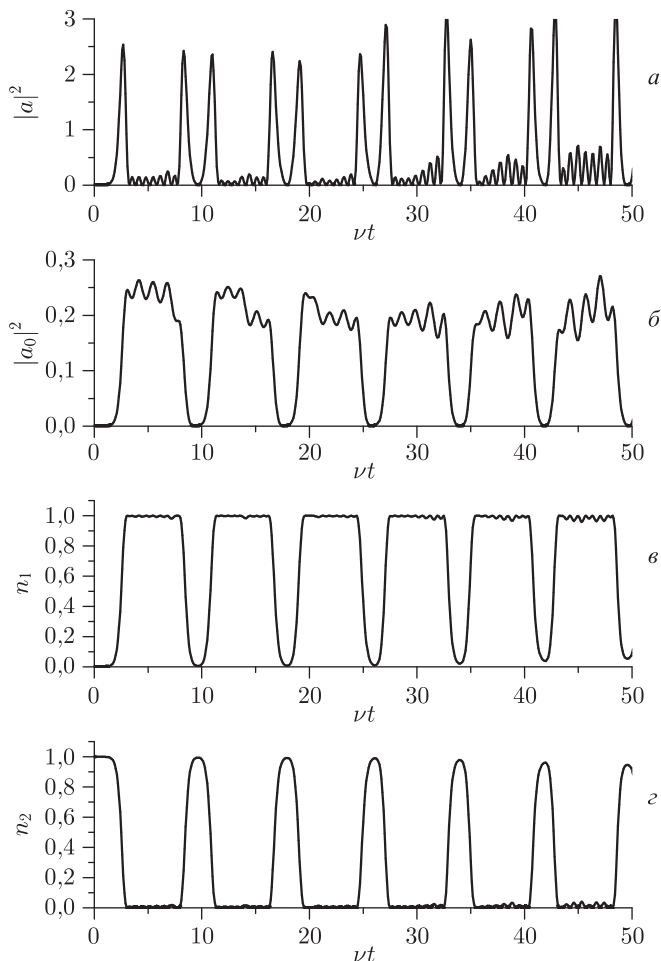


Рис. 13.6. Динамика интегральной интенсивности поля $\left| \sum_n a_n(t) \right|^2$ (а), интенсивности центральной компоненты $|a_0(t)|^2$ (б), населенности нижнего (в) и верхнего (г) атомных уровней в резонаторе с межмодовым расстоянием $\Delta = \Delta\omega_0 \cdot T = \nu$

и нетривиальному выводу. Если полностью возбужденный в начальный момент ансамбль атомов помещен в «пустой» резонатор (т.е. в резонатор, в котором поле находится в вакуумном состоянии), то в одномодовом случае энергетически более выгодным оказывается состояние полной атомно-полевой системы, в котором энергия находится в атомной подсистеме, а поле — в вакуумном состоянии. Указанная тенденция проявляется тем сильнее, чем меньше амплитуда равновес-

ного теплового поля. Чем больше число фотонов в резонаторе, тем ближе к гармоническим становятся осцилляции населенности уровней, следовательно, тем более равновероятными становятся основное и возбужденное состояния атомной подсистемы.

В многомодовом случае ситуация меняется на противоположную: энергетически более выгодным становится состояние системы, когда атомный ансамбль большую часть времени находится в основном состоянии, а поле — в возбужденном. Увеличение числа фотонов в резонаторе приводит, в отличие от одномодового случая, не к выравниванию вероятностей возбужденного и основного состояний атомного ансамбля, а к все большему их отличию. Основное состояние атомной подсистемы становится все более вероятным. Такое поведение системы проиллюстрировано на рис. 13.7, где показана динамика полевых и атомных переменных в случае, аналогичном рис. 13.6, но со следующими начальными условиями: $\sum_{n=-4}^4 |a_n(0)|^2 = 1$, $b_1(0) = 0$, $b_2(0) = 1$, при этом начальные амплитуды всех волн считались равными. Мы видим, что с ростом амплитуды поля его интерференционная структура становится гораздо более резкой, что приводит к уменьшению времени пребывания атомной подсистемы в возбужденном состоянии.

13.3.6. Применение гамильтонова подхода к анализу задач взаимодействия излучения с атомом

а) Резонансный одномодовый случай. Интерпретацию приведенных выше особенностей взаимодействия атома с полем в резонаторе можно провести с использованием гамильтонова подхода. Суть гамильтонова подхода состоит в том, что уравнения взаимодействия излучения с веществом приводятся к форме уравнений Гамильтона, применяемых обычно для решения задач механики, т. е. задач о движении точечных или распределенных тел в поле внешних сил. Основа гамильтонова подхода состоит во введении и использовании канонических переменных — обобщенных координат и импульсов. Приведение уравнений механики к канонической форме позволяет изучать характер поведения системы на основе анализа вида функции Гамильтона, имеющей смысл энергии. В консервативных системах функция Гамильтона (или гамильтониан) представляет собой сумму кинетической и потенциальной энергии системы.

Уравнения взаимодействия ансамбля двухуровневых атомов с одномодовым полем в случае точного совпадения частоты поля с частотой атомного перехода имеют вид трех действительных уравнений,

$$\dot{a} = \nu b_1 b_2, \quad \dot{b}_2 = -\nu a b_1, \quad \dot{b}_1 = \nu a b_2, \quad (13.112)$$

для амплитуды поля $a(t)$ и действительных амплитуд населенностей атомных уровней $b_{1,2}(t)$. Из двух атомных переменных $b_{1,2}(t)$ независимой является только одна, поскольку условие полноты системы

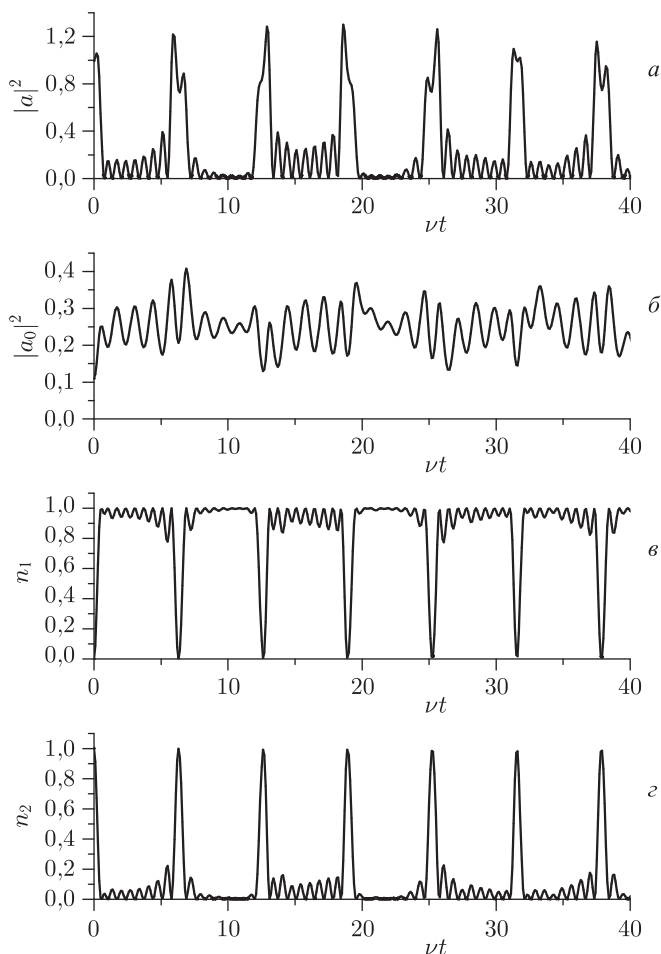


Рис. 13.7. То же, что и на рис. 13.6, но для начальных условий следующего

$$\text{вида } \sum_{n=-4}^4 |a_n(0)|^2 = 1, \quad b_1(0) = 0, \quad b_2(0) = 1$$

собственных функций двухуровневого атома требует выполнения следующего равенства:

$$b_1^2 + b_2^2 = 1,$$

смысл которого состоит в том, что вероятность найти частицу на каком-либо из уровней двухуровневого атома должна быть равна единице. Учитывая эту связь, удобно ввести одну атомную переменную, в качестве которой можно выбрать, например, *угол Блоха* $\theta(t)$, опреде-

ляемый равенством

$$b_2(t) = \cos \theta(t), \quad b_1(t) = \sin \theta(t). \quad (13.113)$$

Подставляя (13.113) в (13.112), получаем

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nu a(t), \quad \frac{\partial a}{\partial t} = \nu \sin \theta(t) \cos \theta(t). \quad (13.114)$$

Несложно видеть, что уравнения (13.114) имеют форму уравнений Гамильтона для переменных θ и a с гамильтонианом

$$H = \frac{\nu a^2}{2} - \frac{\nu}{2} \sin^2 \theta. \quad (13.115)$$

Действительно, из (13.115) получаем

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial a} = \nu a, \quad \frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = \nu \sin \theta \cos \theta.$$

Итак, в соответствие оптической задаче о взаимодействии атома с одномодовым полем мы поставили механическую задачу о точечной частице с координатой θ , движущейся в потенциальном поле

$$U(\theta) = -\frac{\nu}{2} \sin^2 \theta \quad (13.116)$$

и имеющей кинетическую энергию

$$K = \frac{\nu a^2}{2} = \frac{1}{2\nu} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)^2.$$

Таким образом, внутриатомная переменная θ определяет энергию, запасенную в атоме, а амплитуда поля a определяет скорость изменения энергии атома при изменении величины угла Блоха θ .

Зная вид потенциальной энергии (13.116), мы можем предсказать характер поведения атома и характер его отклика на внешнее поле, не решая задачи. Например, если механическая частица помещена без начальной скорости в точку с координатой θ_0 (точка 1 на рис. 13.8), то она будет совершать периодические колебания в потенциале $U(\theta)$, доходя до точки $\pi - \theta_0$ и возвращаясь обратно в точку θ_0 . При таком движении знак скорости частицы будет изменяться, поскольку она движется то в положительном направлении оси θ , то в отрицательном. Следовательно, в оптической задаче мы получим для поля решение в виде периодической знакопеременной функции. На рис. 13.9 показана динамика амплитуды поля $a(t)$, полученная из численного решения уравнений (13.112), при различных начальных условиях: $\theta_0 = 2\pi/5$, $a(0) = 0$ (а); $\theta_0 = \pi/10$, $a(0) = 0$ (б); $\theta_0 = \pi/5$, $a(0) = 0$ (в); $\theta_0 = 0$, $a(0) = 1$ (г); $\theta_0 = 0$, $a(0) = 0,1$ (д); $\theta_0 = 0$, $a(0) = 0,00001$ (е). Из рисунка видно, что при $\theta_0 > 0$ и $a(0) = 0$ (а, б, в) амплитуда поля совершает периодические колебания. Эти колебания тем ближе к гармоническим, чем ближе значение θ_0 к $\pi/2$, т. е. к точке минимума потенциала (13.116), где потенциал приближается к параболическому.

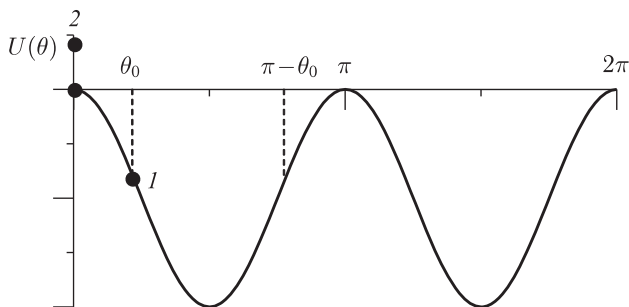


Рис. 13.8. Вид потенциальной кривой $U(\theta)$

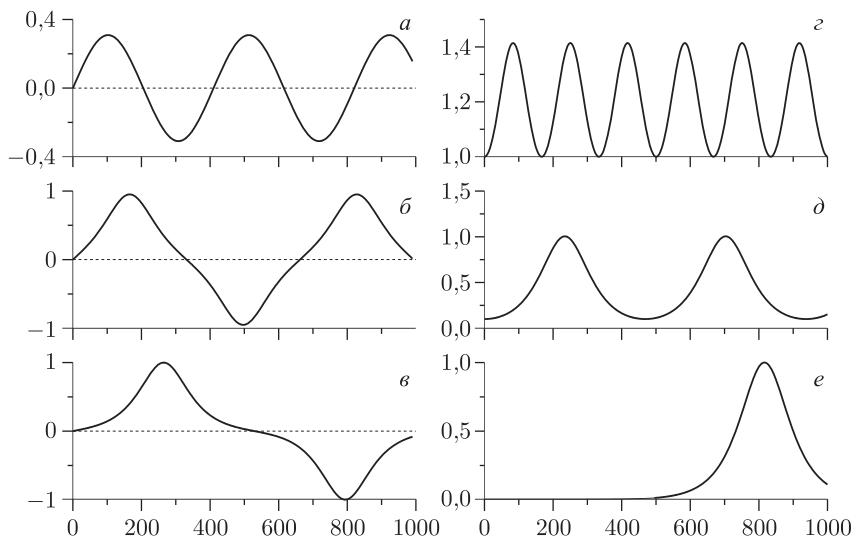


Рис. 13.9. Динамика амплитуды поля при различных начальных условиях: $\theta_0 = 2\pi/5$, $a(0) = 0$ (а), $\theta_0 = \pi/10$, $a(0) = 0$ (б), $\theta_0 = \pi/5$, $a(0) = 0$ (в), $\theta_0 = 0$, $a(0) = 1$ (г), $\theta_0 = 0$, $a(0) = 0,1$ (д), $\theta_0 = 0$, $a(0) = 0,00001$ (е)

Если механическая частица стартует из точки $\theta_0 = 0$ с ненулевой начальной скоростью, то ее скорость также будет периодически меняться во времени, однако она не будет при этом менять знака. Как мы видим из рис. 13.9, это совпадает с результатами численного решения уравнений (13.112).

Особыми точками потенциала механической системы являются точки его экстремума. В рамках линейных теорий выделенную роль играют точки минимума потенциала. Это обусловлено тем, что в незамкнутой системе частица стремится к точке минимума потенциала, отдавая при этом энергию окружению. Точки минимума потенциала являются точками устойчивого равновесия.

В нелинейных консервативных системах выделенную роль начинают играть точки максимума потенциала, несмотря на то что они соответствуют состояниям неустойчивого равновесия системы. Объяснить это можно следующим образом. В линейном мире равновесие системы (в смысле сохранения полной энергии) осуществляется путем периодического превращения энергии в различные формы. Например, потенциальная энергия системы, определяющаяся ее положением в пространстве, превращается в кинетическую, связанную со скоростью перемещения системы в пространстве. В оптической системе это соответствует превращению внутриатомной энергии в энергию электромагнитного поля. Потенциальная энергия линейной системы, которой соответствует параболический потенциал, не имеет точек максимума, поэтому увеличение начальной амплитуды колебаний не может изменить характера движения системы, а приводит лишь к увеличению максимальной передаваемой энергии. Наличие максимумов потенциала является специфической чертой нелинейных систем. Находясь в максимуме потенциала, система может обладать вполне определенной внутренней энергией и может не совершать при этом никаких перемещений в пространстве. Из рис. 13.9 видно, что по мере приближения начальных условий к точке $\theta(0) = 0$, $a(0) = 0$ временной интервал между последовательными импульсами увеличивается. Такое поведение системы предсказывается и аналитическим решением задачи.

Действительно, при $a(0) = 0$ из (13.114) получаем

$$\frac{d\theta}{dt} = \nu \sqrt{\frac{\cos 2\theta_0 - \cos 2\theta}{2}}.$$

Решение этого уравнения выражается через эллиптические функции:

$$\sqrt{\frac{2}{\cos 2\theta_0 - 1}} F\left(\theta, -\frac{2}{\cos 2\theta_0 - 1}\right) \Big|_{\theta_0}^{\theta} = \nu(t - t_0).$$

В предельном случае $\theta_0 \rightarrow 0$ из последней формулы получаем

$$\theta(t) = 2 \operatorname{arctg} [\exp(\nu(t - t_0))], \quad (13.117)$$

где

$$t_0 = \frac{1}{\nu} \left| \ln \left[\operatorname{tg} \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \right] \right|.$$

Из (13.117) для профиля импульса поля получаем

$$a(t) = \frac{1}{\operatorname{ch} [\nu(t - t_0)]}.$$

Таким образом, с уменьшением θ_0 время задержки возрастает и динамика радиационного распада атома стремится к моноимпульсной с профилем поля в виде обратного гиперболического косинуса. Длительность импульса поля по полувысоте профиля его интенсивности $|a(t)|^2$ равна

$$\tau_0 = 0,88/\nu.$$

Итак, мы видим, что стабильность возбужденного состояния атома в пустом одномодовом резонаторе в рамках гамильтоновой интерпретации взаимодействия атома с полем обусловлена наличием точек максимума потенциала. Система достаточно долго находится в этих точках и лишь под влиянием равновесного поля совершает быстрый переход из одной точки неустойчивого равновесия ($\theta_0 = 0$) в другую ($\theta_1 = \pi$). Следует отметить, что ближайшие друг к другу точки максимума потенциала не являются полностью эквивалентными. Действительно, $b_2(\theta = 0) = 1$, $b_1(\theta = 0) = 0$, в то время как $b_2(\theta = \pi) = -1$, $b_1(\theta = \pi) = 0$, поэтому эквивалентные с точки зрения механической системы состояния оказываются неэквивалентными для оптической системы.

б) Отстройка в резонаторе. Пусть теперь ансамбль атомов находится в одномодовом резонаторе, частота которого отстроена от частоты атомного перехода. В этом случае система уравнений взаимодействия имеет вид (13.99)

$$\begin{aligned}\dot{a} &= \nu b_1^* b_2 \exp(i\Delta\omega t), \\ \dot{b}_2 &= -\nu a b_1 \exp(-i\Delta\omega t), \\ \dot{b}_1 &= \nu a^* b_2 \exp(i\Delta\omega t).\end{aligned}$$

Дифференцируя каждое уравнение этой системы и вводя новые переменные

$$\begin{aligned}a(t) &= A(t) \exp(i\Delta\omega t/2), & b_1(t) &= B_1(t) \exp(i\Delta\omega t/2), \\ b_2(t) &= B_2(t) \exp(-i\Delta\omega t/2),\end{aligned}$$

несложно получить следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned}\ddot{A} - \nu^2 \left(|B_2|^2 - |B_1|^2 - \frac{\Delta\omega^2}{4\nu^2} \right) A &= 0, \\ \ddot{B}_1 + \nu^2 \left(|A|^2 - |B_2|^2 + \frac{\Delta\omega^2}{4\nu^2} \right) B_1 &= 0, \\ \ddot{B}_2 + \nu^2 \left(|A|^2 + |B_1|^2 + \frac{\Delta\omega^2}{4\nu^2} \right) B_2 &= 0.\end{aligned}\tag{13.118}$$

Несложно видеть, что полученная система уравнений имеет вид гамильтоновой системы уравнений для пар канонических переменных (A, \dot{A}^*) , (B_1, \dot{B}_1^*) и (B_2, \dot{B}_2^*) с гамильтонианом

$$\begin{aligned}H &= \dot{A}^* \dot{A} + \dot{B}_1^* \dot{B}_1 - \dot{B}_2^* \dot{B}_2 - \nu^2 |A|^2 \left(|B_2|^2 - |B_1|^2 \right) - \\ &- \nu^2 |B_1|^2 |B_2|^2 + \frac{\Delta\omega^2}{4} \left(|A|^2 + |B_1|^2 - |B_2|^2 \right).\end{aligned}\tag{13.119}$$

Действительно, из (13.119), например, получаем

$$\frac{\partial H}{\partial \dot{A}} = \dot{A}^*, \quad \frac{\partial \dot{A}}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial A^*} = \nu^2 \left(|B_2|^2 - |B_1|^2 \right) A - \frac{\Delta\omega^2}{4} A.$$

Несложно видеть, что второе уравнение совпадает с первым уравнением системы уравнений (13.118). Таким образом, анализ возможных решений системы уравнений (13.118) можно провести на основе анализа особых точек потенциальной энергии гамильтониана (13.119).

Однако пользуясь интегралами движения (13.100), задачу можно существенно упростить и получить замкнутое уравнение для каждой из атомных и полевых переменных. Например, уравнение для b_1 имеет вид

$$\ddot{b}_1 - i\Delta\omega\dot{b}_1 + 2\nu^2|b_1|^2 b_1 - \nu^2(1 - C_1)b_1 = 0. \quad (13.120)$$

В случае радиационного распада ансамбля возбужденных атомов в пустом резонаторе константа $C_1 = 0$ и решение уравнения (13.120) имеет вид

$$b_1(t) = \frac{1}{\nu} \sqrt{\nu^2 - \frac{\Delta\omega^2}{4}} \frac{\exp(i\Delta\omega t/2)}{\operatorname{ch} \left[\sqrt{\nu^2 - \frac{\Delta\omega^2}{4}} t \right]}. \quad (13.121)$$

При $\Delta\omega = 0$ решение (13.121) совпадает с полученными ранее решениями (13.106)–(13.107).

Мы видим, что амплитуда и фаза $b_1(t) = B_1(t) \exp[i\varphi_1(t)]$ определяются выражениями

$$B_1(t) = (\Gamma/\nu) \operatorname{sch}(\Gamma t), \quad \varphi_1(t) = \frac{\Delta\omega}{2} t,$$

где $\Gamma = \sqrt{\nu^2 - \Delta\omega^2/4}$. Используя интегралы движения (13.100) и (13.102), несложно определить вид $b_2(t)$:

$$B_2(t) = \sqrt{1 - B_1^2(t)}, \quad \dot{\varphi}_2(t) = \dot{\varphi}_1(t) (B_1/B_2)^2.$$

Следовательно,

$$B_2(t) = \sqrt{1 - \left(\frac{\Gamma}{\nu} \frac{1}{\operatorname{ch}(\Gamma t)} \right)^2},$$

$$\varphi_2(t) = \frac{\Delta\omega}{2\sqrt{\nu^2 - \Gamma^2}} \operatorname{arctg} \left(\frac{\Gamma}{\sqrt{\nu^2 - \Gamma^2}} \operatorname{th}(\Gamma t) \right) = \operatorname{arctg} \left(\frac{\Gamma}{\sqrt{\nu^2 - \Gamma^2}} \operatorname{th}(\Gamma t) \right).$$

Заменой

$$b_1(t) = [f(t) + ig(t)] \exp(i\Delta\omega t/2)$$

уравнение (13.120) легко приводится к гамильтонову виду с гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} (f^2 + \dot{g}^2) + U(f, g),$$

где потенциальная энергия $U(f, g)$ имеет вид

$$U(f, g) = -\frac{1}{2} \left[\nu^2 (1 - C_1) - \frac{\Delta\omega^2}{4} \right] (f^2 + g^2) + \frac{\nu^2}{2} (f^2 + g^2)^2. \quad (13.122)$$

Следовательно, экстремум потенциала (13.122) является максимумом при

$$\nu^2 (1 - C_1) - \frac{\Delta\omega^2}{4} > 0. \quad (13.123)$$

Неравенство (13.123) определяет условие, при котором возбужденное состояние атомной подсистемы в микрорезонаторе является энергетически более выгодным, чем основное.

Таким образом, мы видим, что гамильтонов формализм позволяет получить наглядную интерпретацию возможных сценариев эволюции взаимодействующей атомно-полевой системы. Особый интерес при этом представляет возможность определения условий для реализации решений, соответствующих однократному обмену энергией между полем и средой, т.е. уединенных импульсов вида (13.106), (13.117), (13.121), а также определения начальных условий, соответствующих решениям такого вида, поскольку в протяженной многоатомной среде эти решения соответствуют солитонному режиму распространения коллективных возбуждений атомно-полевой системы.

НЕЛИНЕЙНО ОПТИЧЕСКИЙ ОТКЛИК АТОМА В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

Анализ, проведенный в гл. 5 и 12, показал, что связанные состояния отрицательно частотного спектра, волновые функции которых являются сингулярными при $r = 0$, отвечают за состояние ядра атома. Состояние электронной оболочки атома определяется заселенностью состояний стандартного спектра состояний. Несмотря на то что собственные значения отрицательно частотной зоны состояний могут быть близки к величине собственных значений стандартного базиса состояний, отклик частиц, находящихся в этих состояниях, кардинально отличается от отклика частиц, находящихся в состояниях стандартного базиса. Это связано с тем, что отклик атома на внешнее электромагнитное поле зависит от отношения величины напряженности поля электромагнитной волны к величине напряженности внутриатомного поля. Характерный радиус распределения заряда частиц в состояниях стандартного спектра определяется радиусом Бора, а для частиц, находящихся в связанных отрицательно частотных состояниях, он определяется классическим радиусом частицы. Ясно поэтому, что межзонные переходы могут быть стимулированы лишь внешним полем с напряженностью, значительно превышающей напряженность, стимулирующую переходы между состояниями стандартного базиса состояний. Действительно, приведенные выше оценки показали, что величина матричных элементов межзонных переходов в α^{-1} меньше величины матричных элементов переходов между состояниями стандартного базиса. Все сказанное относится к водородоподобным ионам с не очень тяжелыми ядрами, поскольку, как мы видели выше, реальным параметром малости является параметр $Z\alpha$. Однако в нейтральных атомах с $Z\alpha \rightarrow 1$ состояния отрицательно частотной зоны сильно экранированы наличием большого количества электронов в атомных оболочках, поэтому их взаимодействие с внешним электромагнитным полем не может быть адекватно описано в рамках одночастичной модели. С учетом вышесказанного мы будем в настоящей главе, обсуждая отклик атома на воздействие лазерного поля, по сути дела, рассчитывать отклик, обусловленный движением валентных электронов атома, т. е. будем учитывать, в основном, лишь состояния стандартного спектра состояний.

Анализ задач взаимодействия излучения с атомом, проведенный в предыдущей главе, базировался на двух подходах: теории возмущений и приближений двухуровневого атома. При анализе электродипольных переходов между состояниями стандартного базиса состо-

яний параметром малости теории возмущений является отношение величины энергии электродипольного взаимодействия $H_D = -\mathbf{d}\mathbf{E}_0$ к энергии ионизации частицы из основного состояния стандартного базиса состояний частицы в кулоновском поле: $I_0 \approx e^4 m_0 / 2\hbar^2$. Учитывая оценки величины дипольного момента перехода между состояниями стандартного базиса, получаем: $|\mathbf{d}| \approx d_B = ea_B$, поэтому указанное отношение можно записать в виде

$$\frac{\langle H_D \rangle}{I_0} = \frac{d_B E_0}{I_0} = \frac{eE_0}{F_{at}} = \frac{E_0}{E_{at}},$$

где F_{at} — сила, действующая на атомный электрон со стороны ядра, которую можно оценить следующим образом:

$$F_{at} \approx \left\langle \frac{\partial U_0}{\partial r} \right\rangle = \frac{I_0}{a_B}.$$

Таким образом, параметром малости теории возмущений является отношение напряженности поля электромагнитной волны к напряженности внутриатомного поля. Пока это отношение является малым, мы можем пользоваться алгоритмом, который мы обсудили в разделе 13.2, основа которого состоит в том, что волновая функция задачи об атоме в поле представляется в виде разложения по собственным функциям свободного атома. Однако рост напряженности поля электромагнитной волны существенно меняет характер отклика атома. В очень слабых полях отклик атома является линейным, т. е. частота поля отклика атома совпадает с несущей частотой падающего поля. В квазирезонансных процессах, когда частота падающего поля близка к частоте атомного перехода, частота поля отклика может несколько отличаться от частоты падающего поля, однако эти отличия незначительны: $\hbar\Delta\omega \approx \langle H_D \rangle \ll \hbar\omega_0$. Качественные отличия в характере отклика атома были обнаружены, когда напряженность поля лазерных источников стала приближаться к внутриатомной напряженности. В субатомной области напряженностей поля лазерного импульса отклик атома представляет собой последовательность нечетных гармоник поля лазерного импульса с ярко выраженной частотой отсечки, которая пропорциональна пондеромоторному потенциалу поля, т. е. слагаемому оператора взаимодействия (13.17), пропорциональному квадрату векторного потенциала:

$$U_p = \left\langle \frac{q_0^2 A^2}{2m_0 c^2} \right\rangle = \frac{q_0^2 E_0^2}{4m_0 \omega^2}.$$

При напряженности поля лазерного импульса порядка внутриатомной в спектре отклика происходят качественные изменения: частота отсечки насыщается и перестает зависеть от интенсивности лазерного импульса. Меняются также и угловые зависимости вылета фотоэлектронов, свидетельствующие о возрастающем вкладе высокомультипольных переходов.

Возникающие различия вполне предсказуемы и связаны с отличием симметричных свойств задачи об атоме, взаимодействующем с внешней электромагнитной волной, по сравнению со сферической симметрией задачи свободного атома. Действительно, электромагнитная волна имеет три выделенных направления в пространстве, связанные с направлением вектора напряженности электрического поля \mathbf{E} , магнитного поля \mathbf{B} и волнового вектора \mathbf{k} . Влияние векторов \mathbf{B} и \mathbf{k} на симметрию волновой функции становится существенным лишь при релятивистской напряженности поля лазерной волны $E_{rel} = m\omega c/e$, когда скорость движения электрона становится близка к скорости света, а амплитуда колебаний электрона в поле лазерной волны становится близка к длине волны излучения. Величина релятивистской напряженности поля существенно превосходит внутриатомную, поэтому при анализе взаимодействия атома с лазерным импульсом, напряженность поля которого меньше или порядка внутриатомной, мы можем пользоваться длинноволновым приближением

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \approx \mathbf{A}(t), \quad (14.1)$$

когда

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \neq 0, \quad \mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = 0.$$

В рамках длинноволнового приближения симметрия системы «атом + поле» становится аксиальной. Указанные различия незначительны при $E_0 \ll E_{at}$. Однако при $E_0 \leq E_{at}$ возникает необходимость в развитии непertурбативных методов решения задачи о взаимодействии атома с сильными лазерными полями. В настоящем разделе, следуя работе [58], мы проанализируем специфику взаимодействия атома с лазерными полями околоатомной напряженности.

14.1. Отклик атома в сильном лазерном поле

14.1.1. Краевая задача для свободного атома и атома, взаимодействующего с внешним полем. Краевая задача, определяющая спектр собственных значений и собственных функций свободного водородоподобного атома, имеет вид

$$\left[\frac{1}{2m_0} (\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Phi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m_0 c^2} (E_n - U_0)^2 \Phi_n(\mathbf{r}), \quad (14.2)$$

где $\mathbf{E}_0 = -Zq_0 \mathbf{r}/r^3$ — напряженность поля, создаваемого ядром атома, а $U_0(r) = -Zq_0^2/r$. Спектр собственных значений E_n и собственные волновые функции $\Phi_n(\mathbf{r})$ этой задачи были определены в гл. 12. Как мы отмечали в разделе 13.2.2, в общем случае квантовое число n является многокомпонентным. Однако в настоящей главе мы будем интересоваться откликом атома, обусловленным его валентными электронами, поэтому можно считать, что квантовое число является совокупностью четырех квантовых чисел $\{n, j, l, m\}$: радиального квантового числа n ,

полного углового момента j , орбитального углового момента l и проекции полного углового момента m . Собственные значения энергии уровней вырождены относительно проекции полного углового момента m .

Краевая задача (14.2) с граничными условиями при $r \rightarrow \infty$ и $r \rightarrow 0$ обладает сферической симметрией, поэтому полный угловой момент является сохраняющейся величиной. Как мы отмечали выше, задача о взаимодействии атома с полем внешней электромагнитной волны сферической симметрией не обладает, поэтому базис собственных волновых функций сферически симметричной задачи (14.2) не является удобным базисом для разложения волновой функции нестационарного уравнения для атома в поле внешней электромагнитной волны. Действительно, с ростом напряженности поля лазерной волны количество слагаемых в указанном разложении будет неограниченно возрастать. Обратимся поэтому к краевой задаче следующего вида:

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Theta_n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m_0 c^2} (E_n - U_0)^2 \Theta_n(\mathbf{r}, t), \quad (14.3)$$

где $\chi(\mathbf{r}, t)$ — произвольная функция координат и времени. Зная решение краевой задачи (14.2), мы можем легко определить решение краевой задачи (14.3). Действительно, прямой подстановкой несложно убедиться, что собственные функции краевой задачи (14.3) для тех же самых граничных условий, что используются в краевой задаче (14.2), имеют вид

$$\Theta_n(\mathbf{r}, t) = \Phi_n(\mathbf{r}) \exp\left(i \frac{q_0}{\hbar c} \chi(\mathbf{r}, t)\right), \quad (14.4)$$

где $\Phi_n(\mathbf{r})$ — собственные волновые функции краевой задачи (14.2). Собственные значения, отвечающие собственным функциям (14.4), совпадают с собственными значениями краевой задачи (14.2). Граничные условия краевой задачи (14.3) определяются таким образом, что при $\chi(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0$ они совпадают с граничными условиями краевой задачи (14.2).

Положим, что $\chi(\mathbf{r}, t)$ имеет вид

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{r}, \quad (14.5)$$

тогда краевая задача (14.3) принимает вид

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Theta_n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m_0 c^2} (E_n - U_0)^2 \Theta_n(\mathbf{r}, t). \quad (14.6)$$

Как видно, краевая задача (14.6) принимает вид краевой задачи о движении электрона в кулоновском поле и внешнем электромагнитном поле, описываемом в рамках длинноволнового приближения (14.1).

Отметим, что в (14.6) не учитывается член $i\mu_0\mathbf{a}\mathbf{E}$. Это связано с тем, что, как было показано в разделе 13.2, отношение характерных величин матричных элементов имеет вид: $|\mathbf{P}_{nm}^{(s)}|/|\mathbf{M}_{n'm'}| \approx \alpha$ и $|\mathbf{M}_{n'm'}|/|\mathbf{P}_{nm}^{(t)}| \approx \alpha^3$, поэтому учет матричных элементов $\mathbf{P}_{nm}^{(s)}$ выходит за рамки длинноволнового приближения.

Волновая функция (14.4) принимает теперь вид

$$\Theta_n(\mathbf{r}, t) = \Phi_n(\mathbf{r}) \exp\left(i\frac{q_0}{\hbar c}\mathbf{A}(t)\mathbf{r}\right). \quad (14.7)$$

Экспоненциальный множитель в (14.7) может быть представлен в виде разложения по сферическим гармоникам:

$$\exp\left(i\frac{q}{\hbar c}\mathbf{A}\mathbf{r}\right) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l\left(\frac{q}{\hbar c}Ar\right) Y_{lm}^*\left(\frac{\mathbf{A}}{A}\right) Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right),$$

где $j_l(z)$ — функция Бесселя полуцелого порядка (или сферическая функция Бесселя), а $Y_{lm}(\mathbf{e})$ — шаровые функции. Из последней формулы видно, что собственная волновая функция (14.7), отвечающая энергии $E_{n,j,l}$ свободного атома, в присутствии внешнего электромагнитного поля становится аксиально симметричной с осью симметрии, совпадающей с вектором \mathbf{A} , и представляется в виде бесконечного ряда сферических спиноров, вид которых определяется выражением (13.30).

Волновые функции $\Phi_n(\mathbf{r})$ удовлетворяют условию ортонормированности

$$\frac{1}{m_0c^2} \int \overline{\Phi}_m(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(\mathbf{r})\right) \Phi_n(\mathbf{r}) dV = \pm\delta_{nm}. \quad (14.8)$$

Несложно видеть, что такому же условию ортонормированности удовлетворяют собственные волновые функции краевой задачи (14.3):

$$\frac{1}{m_0c^2} \int \overline{\Theta}_m(\mathbf{r}, t) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(\mathbf{r})\right) \Theta_n(\mathbf{r}, t) dV = \pm\delta_{nm}. \quad (14.9)$$

Таким образом, волновые функции

$$\Phi_n(\mathbf{r}, t) = \Phi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right), \quad \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \Theta_n(\mathbf{r}, t) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)$$

составляют два полных ортогональных базиса. Следовательно, любая собственная функция одного базиса может быть представлена в виде разложения по собственным функциям второго базиса. Например,

$$\begin{aligned} \Psi_n(\mathbf{r}, t) &= \sum_m c_{nm}(t) \Phi_m(\mathbf{r}, t), \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} + \frac{q_0}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \Psi_n &= \sum_m E_m c_{nm} \Phi_m(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (14.10)$$

Тогда, используя (14.8), для коэффициентов разложения C_{nm} получаем

$$c_{nm}(t) = C_{nm} \exp\left(i\frac{E_m - E_n}{\hbar}t\right),$$

где

$$C_{nm}(t) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \bar{\Phi}_m(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0 \right) \exp \left(i \frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r} \right) \Phi_n(\mathbf{r}) dV. \quad (14.11)$$

Таким образом, для разложения волновых функций (14.7) по собственным волновым функциям свободного атома получаем

$$\Theta_n(\mathbf{r}, t) = \sum_m C_{nm} \Phi_m(\mathbf{r}). \quad (14.12)$$

Аналогично, используя разложения

$$\Phi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_m d_{nm}(t) \Psi_m(\mathbf{r}, t), \quad i\hbar \frac{\partial \Phi_n}{\partial t} = \sum_m E_m d_{nm} \Psi_m(\mathbf{r}, t), \quad (14.13)$$

для разложения волновых функций свободного атома по волновым функциям краевой задачи (14.6) получаем

$$\Phi_n(\mathbf{r}) = \sum_m D_{nm} \Theta_m(\mathbf{r}, t), \quad (14.14)$$

где

$$D_{nm}(t) = \frac{1}{m_0 c^2} \int \bar{\Phi}_m(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0 \right) \exp \left(-i \frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r} \right) \Phi_n(\mathbf{r}) dV. \quad (14.15)$$

Подставляя (14.13) в (14.10), получаем

$$\Psi_n = \sum_{k,m} c_{nm} d_{mk} \Psi_k, \quad i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} + \frac{q_0}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \Psi_n = \sum_k E_k \sum_m c_{nm} d_{mk} \Psi_k, \quad (14.16)$$

следовательно, матрицы (14.11) и (14.15) удовлетворяют следующему условию:

$$\sum_m c_{nm} d_{mk} = \sum_m C_{nm} D_{mk} = \delta_{nk}, \quad (14.17)$$

поскольку в этом случае соотношения (14.16) принимают вид

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \sum_{k,m} c_{nm} d_{mk} \Psi_k = \Psi_n, \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} + \frac{q_0}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \Psi_n &= \sum_k E_k \sum_m c_{nm} d_{mk} \Psi_k = E_n \Psi_n. \end{aligned}$$

Удобно ввести матрицу преобразования

$$W_{nm} = \frac{1}{m_0 c^2} \int \bar{\Phi}_m(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0 \right) \exp \left(-i \frac{q_0}{\hbar c} \chi \right) \Phi_m(\mathbf{r}) dV,$$

тогда

$$D_{nm} = W_{mn}, \quad C_{nm} = W_{nm}^+$$

и условие (14.17) принимает вид условия унитарности матрицы преобразования: $W^{-1} = W^+$. В частности, для функции χ , определяемой выражением (14.5), получаем

$$W_{nm} = \frac{1}{m_0 c^2} \int \bar{\Phi}_n(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0 \right) \exp \left(-i \frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r} \right) \Phi_m(\mathbf{r}) dV. \quad (14.18)$$

Отметим, что сумма в разложениях (14.12) и (14.14) подразумевает суммирование по дискретным уровням атома и интегрирование по состояниям непрерывного спектра.

14.1.2. Уравнения для амплитуд населенности уровней.

Рассмотрим, в чем состоят преимущества введения базиса состояний аксиально симметричной краевой задачи (14.6). Общее уравнение движения электрона в кулоновском поле и поле плоской электромагнитной волны имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 \Psi = \\ = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \mu_0 (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B} - i \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}) \right] \Psi, \end{aligned} \quad (14.19)$$

где векторный потенциал \mathbf{A} является в общем случае функцией координат и времени $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, поэтому

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \nabla \varphi_0(\mathbf{r}).$$

В длинноволновом приближении уравнение (14.19) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 \Psi = \\ = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Psi. \end{aligned} \quad (14.20)$$

Введем следующее обозначение для оператора в правой части уравнения (14.20):

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0. \quad (14.21)$$

Этот оператор совпадает с оператором краевой задачи (14.6). В свою очередь сопряженная собственная волновая функция $\bar{\Phi}_n(\mathbf{r}, t)$ краевой задачи (14.2) удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + U_0 \right)^2 \bar{\Phi}_n = \bar{\Phi}_n \left[\frac{1}{2m_0} (\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] = \bar{\Phi}_n H_0^\dagger. \quad (14.22)$$

Умножая обе части уравнения (14.20) слева на $\bar{\Phi}_n$, а обе части уравнения (14.22) справа на Ψ и взяв затем разность получившихся уравнений, после интегрирования по объему получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int \frac{1}{m_0 c^2} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\bar{\Phi}_n \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \bar{\Phi}_n}{\partial t} \Psi \right) - \bar{\Phi}_n U_0 \Psi \right] dV = \\ = \int \left(\bar{\Phi}_n \cdot H \Psi - \bar{\Phi}_n H_0^\dagger \cdot \Psi \right) dV. \quad (14.23)$$

Разложим волновую функцию уравнения (14.20) в ряд по собственным функциям краевой задачи (14.2):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \Phi_n(\mathbf{r}, t). \quad (14.24)$$

Подставляя (14.24) в (14.23), получаем

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_{m, k} W_{nk}^{-1} (E_k - E_n) W_{km} a_m(t). \quad (14.25)$$

Учитывая соотношение (14.17), получаем

$$\frac{da_n}{dt} = i\omega_n a_n - \frac{i}{\hbar} \sum_{m, k} W_{nk}^{-1} E_k W_{km} a_m. \quad (14.26)$$

Несложно видеть, что, несмотря на то что мы используем длинноволновое приближение, получившаяся система уравнений для амплитуд населенности уровней кардинально отличается от системы уравнений (13.25), матричные элементы в правой части которой определяются выражением (13.28). Действительно, матричные элементы (13.28) содержат лишь скалаемые, пропорциональные первой и второй степеням векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ или его производных, в то время как правая часть системы уравнений (14.26) содержит матричные элементы, пропорциональные произвольным степеням векторного потенциала, что видно из определения матричных элементов (14.18). Причина указанных кардинальных различий кроется в том, что при выводе (13.28) мы использовали соотношения (6.16)–(6.18), которые имеют одинаковый вид в случае скалярных и спинорных полей, но которые, однако, являются следствием уравнения (6.14) для свободного атома в скалярном случае или аналогичного ему уравнения (7.24) в спинорном случае.

Если обратиться к выводу уравнений для амплитуд населенности уровней и выводу соотношения (6.16), то несложно видеть, что в первом случае мы используем уравнение для волновой функции атома во внешнем электромагнитном поле и уравнение для сопряженной волновой функции свободного атома. В свою очередь во втором случае мы используем уравнение для волновой функции свободного атома и уравнение для сопряженной волновой функции свободного атома.

Из общих соображений ясно, что соотношение (6.16) справедливо лишь в рамках применимости теории возмущений. Это утверждение можно проиллюстрировать и следующим образом. Действительно, правую часть уравнения (14.23) можно записать также в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sum_m a_m \int \bar{\Phi}_n (H - H_0) \Phi_m dV = \\ = \sum_m a_m \int \bar{\Phi}_n \left(-\frac{q_0}{2m_0c} \mathbf{A} \mathbf{p} + \frac{q_0^2}{m_0c^2} \mathbf{A}^2 \right) \Phi_m dV. \end{aligned} \quad (14.27)$$

Подставляя (14.27) в (14.23), мы получаем систему уравнений (13.25) в электродипольном приближении. При $E_0 \ll E_{at}$ матрицу преобразования (14.18) можно записать в виде

$$W_{nm} = \delta_{nm} - i \frac{q_0}{\hbar c} \int \mathbf{A} \mathbf{r} \rho_{nm} dV + \dots, \quad (14.28)$$

где

$$\rho_{nm} = \frac{1}{m_0c^2} \bar{\Phi}_n(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0(\mathbf{r}) \right) \Phi_m(\mathbf{r}).$$

Подставляя (14.28) в (14.25), получаем

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = -i \frac{q_0}{c} \sum_m a_m \omega_{nm} \int \mathbf{A} \mathbf{r} \rho_{nm} dV. \quad (14.29)$$

Таким образом, в резонансном приближении, когда

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0(t) \exp(-i\omega_{nm}t),$$

получаем

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = -q_0 \sum_m a_m(t) \int \mathbf{E} \mathbf{r} \rho_{nm} dV = - \sum_m \int \mathbf{E} \mathbf{P}_{nm}^{(t)} dV a_m(t).$$

Как видно, полученная система уравнений совпадает с системой уравнений (13.25) в электродипольном приближении. Точное выражение для матрицы преобразования W_{nm} имеет вид

$$W_{nm} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{1}{m_0c^2} \int \bar{\Phi}_n(\mathbf{r}) \left(\frac{E_n + E_m}{2} - U_0 \right) \left(-i \frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A} \mathbf{r} \right)^k \Phi_m(\mathbf{r}) dV. \quad (14.30)$$

Как видно, в общем случае матричные элементы W_{nm} являются нелинейными функциями напряженности поля лазерной волны и включают все степени поля \mathbf{A}^n . Возможность ограничиться двумя слагаемыми в (14.30) определяется величиной показателя экспоненты. Величину показателя экспоненты мы можем легко оценить для радиационных переходов в водородоподобном атоме. В этом случае получаем

$$\frac{q_0 A_0 a_B}{\hbar c} = \frac{|e| a_B E_0}{\hbar \omega} \approx \frac{E_0}{E_{at}}.$$

Следовательно, параметром малости задачи является отношение напряженностей поля лазерной волны и внутриатомного поля. При $E_0 \ll E_{at}$

мы можем ограничиться приближением (14.29) общей системы уравнений (14.26). При $E_0 \geq E_{at}$ количество существенных слагаемых в правой части (14.26) определяется видом матричных элементов W_{nm} . Следует отметить, что матричные элементы W_{nm} для водородоподобного атома вычисляются в аналитической форме. Несложно видеть, что указанные матричные элементы являются нелинейными функциями амплитуды поля, и потому их разложения в ряд по степеням поля содержат слагаемые, пропорциональные всем степеням поля.

14.1.3. Калибровочная инвариантность. Можно показать, что система уравнений (14.26) удовлетворяет принципу калибровочной инвариантности. Обратимся к случаю, когда $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0$, где \mathbf{A}_0 — векторная константа. В этом случае как волновая функция

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \Theta_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) = \Phi_n(\mathbf{r}, t) \exp\left(i\frac{q_0}{\hbar c}\mathbf{A}_0\mathbf{r}\right),$$

так и волновая функция

$$\frac{\partial \Psi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -i\frac{E_n}{\hbar}\Phi_n(\mathbf{r}, t) \exp\left(i\frac{q_0}{\hbar c}\mathbf{A}_0\mathbf{r}\right)$$

являются одновременно решениями краевой задачи (14.3), поэтому мы можем разложить волновую функцию уравнения (14.19) в ряд как по собственным функциям $\Phi_n(\mathbf{r}, t)$, так и по функциям $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$. Соответствующие разложения имеют вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t)\Phi_n(\mathbf{r}, t), \quad (14.31)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n b_n(t)\Psi_n(\mathbf{r}, t), \quad (14.32)$$

где

$$a_n = \frac{1}{m_0 c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \bar{\Phi}_n}{\partial t} \Psi - \bar{\Phi}_n \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \bar{\Phi}_n U \Psi \right] dV,$$

$$b_n = \frac{1}{m_0 c^2} \int \left[-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}_n}{\partial t} \Psi - \bar{\Psi}_n \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \bar{\Psi}_n U \Psi \right] dV.$$

Подставляя разложения (14.31) в правую часть уравнения (14.23), получаем

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_m \int \bar{\Phi}_n \left(-\frac{q_0}{m_0 c} \mathbf{A}_0 \mathbf{p} + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \mathbf{A}_0^2 \right) \Phi_m dV \cdot a_m. \quad (14.33)$$

С другой стороны, в рассматриваемом случае $\bar{\Psi}_n(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяют уравнению

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + U_0 \right)^2 \bar{\Psi}_n(\mathbf{r}, t) = \\ = \bar{\Psi}_n(\mathbf{r}, t) \left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right], \end{aligned} \quad (14.34)$$

поэтому вместо (14.23) получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int \frac{1}{m_0 c^2} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\bar{\Phi}_n \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \bar{\Phi}_n}{\partial t} \Psi \right) - \bar{\Phi}_n U_0 \Psi \right] dV = \\ = \int (\bar{\Phi}_n \cdot H \Psi - \bar{\Phi}_n H^\dagger \cdot \Psi) dV.$$

Следовательно,

$$i\hbar \frac{db_n}{dt} = 0. \quad (14.35)$$

Как мы уже неоднократно отмечали, изменение потенциалов поля на постоянную величину не должно приводить к изменению значений наблюдаемых величин, это следует из принципа калибровочной инвариантности. Как видно из (14.33) и (14.35), разложение по собственным функциям краевой задачи (14.3) находится в полном соответствии с принципом калибровочной инвариантности: изменение на постоянную величину векторного потенциала не приводит к изменению населенности уровней, которая является наблюдаемой величиной. С другой стороны, разложение волновой функции по собственным волновым функциям свободного атома приводит к тому, что населенности уровней начинают изменяться. Это связано с тем, что собственные волновые функции краевой задачи (14.3) имеют цилиндрическую симметрию, в то время как собственные волновые функции краевой задачи (14.2) являются собственными волновыми функциями сферически симметричной краевой задачи свободного атома, поэтому изменение векторного потенциала на постоянную величину приводит к перестройке волновой функции.

14.1.4. Поле отклика атома. Определив волновую функцию атома во внешнем поле, мы можем рассчитать поле отклика атома, которое определяется решением следующего уравнения:

$$\Delta \mathbf{A}_r - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}_r}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (14.36)$$

где плотность тока, отвечающая уравнению (14.20), имеет вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{2m_0} \left[\left(i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Psi} \cdot \Psi + \bar{\Psi} \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \right] - \\ - i\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi). \quad (14.37)$$

Подставляя в (14.37) волновую функцию (14.24), получаем

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{2m_0} \sum_{n, m} a_n^* a_m \left[\left(\mathbf{p} + \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\Phi}_n \cdot \Phi_m + \bar{\Phi}_n \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Phi_m \right]. \quad (14.38)$$

Поскольку в рамках используемого приближения мы положили $-\mathbf{PE} \approx \approx -\mathbf{PE}_0$, то спиновая часть волновой функции остается неизменной,

поэтому $\int \bar{\Phi}_n \boldsymbol{\alpha} \Phi_m dV = \int \bar{\Phi}_n \boldsymbol{\alpha} \Phi_n dV \cdot \delta_{nm}$ и, следовательно, последнее слагаемое в (14.37) не дает отклика на частоте внешнего поля или его гармоник, поэтому в (14.38) мы его опустили.

Итак, для расчета поля отклика атома нам необходимо рассчитать матричные элементы оператора скорости $\mathbf{v} = \frac{1}{m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right)$. Используя (14.7), получаем

$$\int \bar{\Theta}_n(\mathbf{r}, t) \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Theta_m(\mathbf{r}, t) dV = \int \bar{\Phi}_n(\mathbf{r}) \mathbf{p} \Phi_m(\mathbf{r}) dV. \quad (14.39)$$

Полученное соотношение показывает, что решения краевой задачи (14.6) позволяют связать матричные элементы оператора скорости $\mathbf{v} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)$ по собственным волновым функциям краевой задачи о движении атома во внешнем поле с матричными элементами оператора импульса для состояний свободного атома \mathbf{p}_{nm} . Как мы отмечали ранее, именно оператор скорости, а не оператор импульса, отвечает наблюдаемой величине при взаимодействии частицы с внешним полем. В свою очередь матричные элементы оператора скорости по волновым функциям задачи свободного атома имеют вид

$$\int \bar{\Phi}_n \left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A} \right) \Phi_m dV = \sum_{p, q} W_{np}^{-1} \mathbf{p}_{pq} W_{qm}. \quad (14.40)$$

Таким образом, матричные элементы оператора скорости по волновым функциям свободного атома представляют собой бесконечный ряд матричных элементов оператора импульса по волновым функциям свободного атома. Количество существенных слагаемых в правой части (14.40) определяется видом матричных элементов V_{nm} .

Спектр поля отклика атома определяется решением уравнения (14.36) и на далеких расстояниях имеет вид

$$\mathbf{A}_r(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\exp(ikR)}{Rc} \int \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) dV, \quad (14.41)$$

где R — расстояние до точки наблюдения и $\mathbf{k} = \mathbf{R}\omega/Rc$. Используя (14.38) и (14.40), получаем

$$\mathbf{A}_r(\omega) = \frac{q_0}{Rm_0c} \sum_{n, m, p, q} \int a_n^*(t) a_m(t) W_{np}^{-1}(t) \mathbf{p}_{pq} W_{qm}(t) \exp(i\omega t) dt. \quad (14.42)$$

Для спектра интенсивности отклика окончательно получаем

$$\frac{dI(\mathbf{k}, \omega)}{d\Omega} = \frac{q^2}{2\pi c m^2} \times \left| \sum_{n, m, p, q} \int a_n^*(t) a_m(t) W_{np}^{-1}(t) [\mathbf{k}\mathbf{p}_{pq}] W_{qm}(t) \exp(i\omega t) dt \right|^2. \quad (14.43)$$

Отметим, что в (14.42) мы опустили экспоненциальный множитель в подинтегральном выражении формулы (14.41), положив, что как для лазерного излучения, так и для излучения гармоник выполняется условие $\mathbf{k}_n \mathbf{r} \approx n a_B / \lambda \ll 1$ (где a_B — радиус Бора, а λ — длина волны излучения). Однако для высоких оптических гармоник отклика может оказаться, что $k_n a_B \geq 1$. В этом случае поле отклика определяется выражением (14.42), в котором необходимо произвести замену

$$\mathbf{p}_{pq} \rightarrow \frac{1}{2} [(\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) \mathbf{p})_{pq} + (\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \mathbf{p})_{qp}^*].$$

14.1.5. Атом в лазерном поле релятивистской напряженности.

Краевая задача о взаимодействии атома с произвольным электромагнитным полем имеет вид

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \mu_0 \Sigma \mathbf{B} + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (14.44)$$

Учитывая соотношение между величиной матричных элементов, мы, так же как и в (14.6), опустили слагаемое $i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}$. Подстановка в (14.44) волновой функции в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(i \frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathbf{r}\right) \Phi(\mathbf{r}, t)$$

приводит уравнение (14.44) к следующему виду:

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \mu_0 \Sigma \mathbf{B} + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Phi(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (14.45)$$

где $\mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t)$ — вихревая часть электромагнитного поля. Как было отмечено в [58], в случае произвольного поля $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ удобно воспользоваться следующим тождеством векторной алгебры:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \nabla(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathbf{r}) - x_i \nabla A_i(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t), \quad (14.46)$$

где подразумевается суммирование по повторяющемуся индексу. Первое слагаемое в (14.46) соответствует градиентной части поля, а второе — вихревой. Действительно,

$$\text{rot } \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) \equiv 0, \quad \text{rot } \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Трансляционную часть гамильтониана взаимодействия уравнения (14.45) можно привести к виду

$$- \frac{q_0}{2m_0 c} (\mathbf{p} \mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_2 \mathbf{p}) + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \mathbf{A}_2^2 = - \frac{q_0 \hbar}{2m_0 c} \mathbf{B} \mathbf{l} - \frac{i\hbar q_0}{2m_0 c} \mathbf{r} \Delta \mathbf{A} + \\ + \frac{q_0}{2m_0 c} \frac{\partial A_i}{\partial x_j} (x_i p_j + x_j p_i) + \frac{q_0^2}{2m_0 c^2} \mathbf{A}_2^2, \quad (14.47)$$

где $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ и $\hbar \mathbf{l} = [\mathbf{r} \mathbf{p}]$ — оператор углового момента. По соображениям, обсуждавшимся в разделе 13.2, мы можем оставить в правой части (14.47) лишь первое слагаемое, тогда в приближении $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \approx \mathbf{B}(t)$ мы приходим к следующей краевой задаче:

$$\left[\frac{1}{2m_0} (\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2) - (\mu_B \mathbf{l} + \mu_0 \boldsymbol{\Sigma}) \mathbf{B}(t) + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Phi_n(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{1}{2m_0 c^2} (E_n - U_0)^2 \Phi_n(\mathbf{r}, t), \quad (14.48)$$

где $\mu_B = q_0 \hbar / 2m_0 c$ — магнетон Бора. Как видно, краевая задача (14.48) является краевой задачей для атома водорода, взаимодействующего с постоянным магнитным полем. Зная решение этой задачи, мы можем определить решения краевой задачи

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\left(\mathbf{p} - \frac{q_0}{c} \nabla (\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathbf{r}) \right)^2 + m_0^2 c^2 \right) - \right. \\ \left. - (\mu_B \mathbf{l} + \mu_0 \boldsymbol{\Sigma}) \mathbf{B} + i\mu_0 \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_0 \right] \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - U_0 \right)^2 \Psi_n(\mathbf{r}, t),$$

которые имеют вид

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \exp \left(i \frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \right) \Phi_n(\mathbf{r}, t). \quad (14.49)$$

Следует отметить, что первый множитель волновой функции (14.49) уже не обладает аксиальной симметрией, поскольку зависит от направления волнового вектора электромагнитной волны.

Отметим в заключение, что при поиске точных решений краевой задачи об атоме в произвольном поле можно также воспользоваться следующим выражением. Используя условие поперечности поля электромагнитной волны, вихревую часть поля можно представить в следующем виде:

$$\mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t) = -i [\mathbf{l} \mathbf{A}],$$

где \mathbf{l} — оператор углового момента. Поскольку оператор углового момента является генератором операции трехмерных вращений, то указанное представление позволяет применить общие методы теории групп для поиска точных решений краевой задачи в случае произвольного электромагнитного поля $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.

14.2. Симметричные свойства матричных элементов

Учитывая, что волновые функции базиса состояний зеркальных частиц сингулярны в нуле, из формулы (14.18) несложно видеть, что недиагональные матричные элементы W_{nm} для переходов между связанными состояниями отрицательно частотного спектра близки к нулю. Поэтому в настоящем разделе мы будем рассматривать отклик ато-

ма, связанный с переходами внешних электронов атома между уровнями стандартного спектра. Используя формулы гл. 12, матричные элементы W_{nm} можно рассчитать в аналитическом виде. Однако получающиеся выражения слишком громоздки, поэтому в целях наглядности мы приведем выражения для матричных элементов переходов между состояниями стандартного базиса, используя приближение $Z\alpha \ll 1$, хотя это ограничение не является принципиальным.

14.2.1. Матричные элементы. Итак, в нерелятивистском приближении коэффициенты разложения волновой функции в ряд по собственным функциям свободного атома определяются из решения системы уравнений (14.26)

$$\frac{da_n}{dt} = i\omega_n a_n - i \sum_{m,k} W_{nk}^{-1} \omega_k W_{km} a_m.$$

Как видно, населенности уровней определяются в первую очередь величиной составного матричного элемента

$$M_{nm} = \sum_k W_{nk}^{-1} \omega_k W_{km}. \quad (14.50)$$

В свою очередь спектр отклика атома, как следует из (14.42), определяется величиной матричных элементов

$$\mathbf{P}_{nm}(t) = \sum_{p,q} W_{np}^{-1} \mathbf{p}_{pq} W_{qm}. \quad (14.51)$$

Матричные элементы оператора импульса, входящие в (14.51), рассчитываются для состояний свободного атома, поэтому мы можем воспользоваться соотношением $\mathbf{p}_{nm} = im\omega_{nm}\mathbf{r}_{nm}$, которое является в этом случае точным и строгим.

Оператор $W = \exp\left(-i\frac{q_0}{\hbar c}\mathbf{A}\mathbf{r}\right)$ может быть представлен в виде суммы четной $W^{(e)}$ и нечетной $W^{(o)}$ частей:

$$W = W^{(e)} - iW^{(o)} = \cos\left(\frac{q_0\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\mathbf{r}}{\hbar c}\right) - i \sin\left(\frac{q_0\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\mathbf{r}}{\hbar c}\right). \quad (14.52)$$

Четная часть остается неизменной при операции пространственной инверсии $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ и является бесконечным рядом четных степеней функции $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, нечетная часть меняет знак при операции пространственной инверсии и является бесконечным рядом нечетных степеней функции $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. При взаимодействии атома с полем квазимонохроматической волны, например

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(t) \cos(\omega t - \mathbf{kr}),$$

оператор V представляет собой производящую функцию для функций Бесселя

$$\exp(-i\beta \cos \Phi) = J_0(\beta) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k J_{2k}(\beta) \cos(2k\Phi) - \\ - 2i \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k J_{2k+1}(\beta) \cos((2k+1)\Phi), \quad (14.53)$$

где

$$\beta(\mathbf{r}, t) = \frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}_0(t) \mathbf{r}, \quad \Phi = \omega t - \mathbf{k} \mathbf{r}.$$

Следовательно, матричные элементы оператора W подчиняются следующему правилу:

$$W_{nm}(t) = \begin{cases} W_{nm}^{(e)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} W_{nm}^{(2k)} \exp(-i2k\omega_0 t), & p_n = p_m, \\ W_{nm}^{(o)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} W_{nm}^{(2k+1)} \exp(-i(2k+1)\omega_0 t), & p_n = -p_m, \end{cases} \quad (14.54)$$

где p_n — собственное значение оператора четности, а явный вид матричных элементов $W_{nm}^{(k)}$ будет определен ниже.

Указанные симметричные свойства матричных элементов оператора W не зависят от состояния поляризации падающей волны. Однако явный вид матричных элементов $W_{nm}^{(k)}$ существенно зависит от состояния поляризации падающей волны. Если поле является линейно поляризованным, то ось z удобно выбрать совпадающей по направлению с вектором напряженности поля лазерной волны, тогда

$$\mathbf{A}(t) \mathbf{r} = A_0(t) r \cos \theta \cos \Phi.$$

В случае циркулярно поляризованной волны ось z удобно выбрать совпадающей по направлению с волновым вектором, в этом случае для плоской электромагнитной волны получаем

$$\mathbf{A}(t) \mathbf{r} = A_0(t) r \sin \theta \cos(\Phi - \varphi).$$

Различие матричных элементов W_{nm} в указанных двух случаях связано с тем, что для линейно поляризованной волны оператор W аксиально-симметричен, а в случае циркулярно поляризованных волн он зависит также и от полярного угла φ . В дальнейшем мы будем, как правило, полагать, что поле является линейно поляризованным. Случай круговой поляризации будет рассмотрен особо.

14.2.2. Матричные элементы. Используя волновые функции атома водорода, определенные в гл. 12, матричные элементы W_{nm} можно рассчитать в аналитическом виде. На рис. 14.1 показаны диагональные и недиагональные матричные элементы для ряда переходов.

Как видно из рис. 14.1, *а*, диагональные матричные элементы равны единице в полях субатомной напряженности, а в области напряженности поля лазерного импульса порядка внутриатомной их значения резко падают до нуля. Из рис. 14.1, *б* видно, что недиагональные матричные элементы равны нулю в полях субатомной напряженности и становятся отличными от нуля в полях внутриатомной напряженности. Это относится к состояниям как одинаковой, так и противоположной четности.

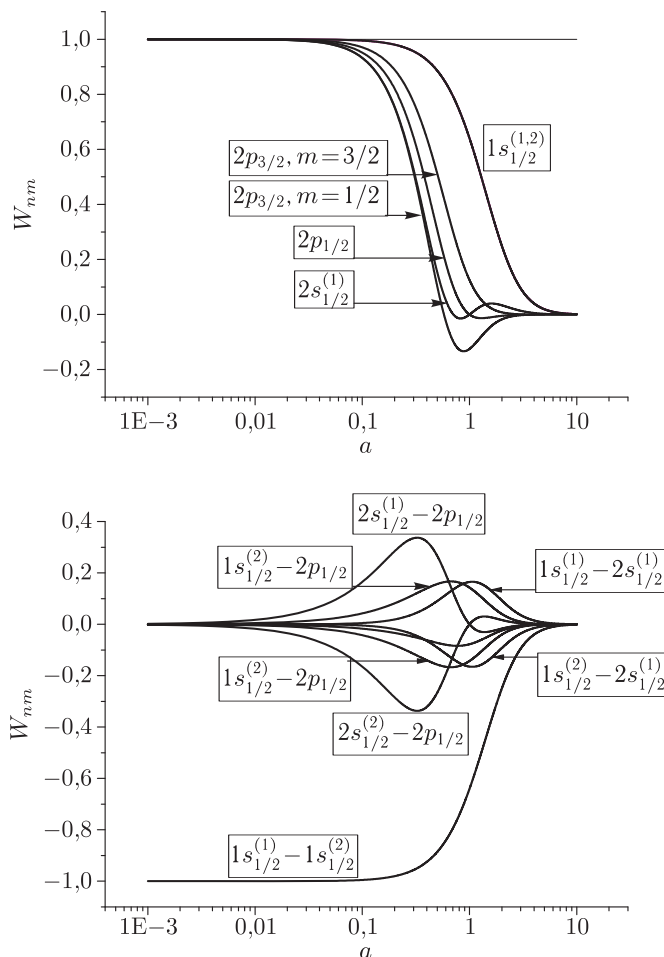


Рис. 14.1. Диагональные матричные элементы для ряда состояний стандартного базиса (*а*); недиагональные матричные элементы для ряда состояний стандартного базиса (*б*)

Ниже приведен аналитический вид ряда матричных элементов в приближении $\alpha \rightarrow 0$. Отметим, что следующий член разложения пропорционален α^2 , поэтому для атома водорода указанные матричные элементы с высокой степенью точности совпадают с матричными элементами, рассчитываемыми с помощью волновых функций, приведенных в гл. 12 (которые мы не приводим ввиду их громоздкости). Для состояний стандартного базиса состояний эти матричные элементы имеют вид

$$\begin{aligned} \langle 1s|W|1s \rangle &= \frac{16}{(4+a^2)^2}, & \langle 2s|W|2s \rangle &= \frac{1-3a^2+2a^4}{(1+a^2)^4}, \\ \langle 2p, m=1|W|2p, m=1 \rangle &= \frac{1}{(1+a^2)^3}, \\ \langle 2p, m=0|W|2p, m=0 \rangle &= \frac{1-5a^2}{(1+a^2)^4}, & \langle 1s|W|2s \rangle &= \frac{256\sqrt{2}a^2}{(9+4a^2)^3}, \\ \langle 1s|W|2p \rangle &= \frac{384\sqrt{2}a}{(9+4a^2)^3}, & \langle 2s|W|2p \rangle &= \frac{3a(1-a^2)}{(1+a^2)^4}, \\ \langle 1s|W|3s \rangle &= \frac{432\sqrt{3}a^2(16+27a^2)}{(16+9a^2)^4}, & \langle 1s|W|3p \rangle &= \frac{864\sqrt{2}a(16+27a^2)}{(16+9a^2)^4}, \\ \langle 1s|W|3d \rangle &= \frac{6912\sqrt{6}a^2}{(16+9a^2)^4}, \end{aligned}$$

где

$$a(t) = \frac{q_0 a_B A_0}{\hbar c} f(t). \quad (14.55)$$

Учитывая, что для монохроматической волны амплитуда электрического поля волны E_0 связана с амплитудой векторного потенциала соотношением $E_0 = A_0 \omega / c$, несложно видеть, что основным параметром задачи является следующий:

$$\mu = \frac{q_0 a_B A_0}{\hbar c} = \frac{d_0 E_0}{\hbar \omega}, \quad (14.56)$$

где $d_0 = |e|a_B$ — дипольный момент, имеющий величину 1 Дебай. Несложно видеть, что параметр (14.56) равен отношению характерной энергии $d_0 E_0$ взаимодействия атома с полем к энергии кванта поля. Этот параметр можно также интерпретировать как отношение силы, действующей на электрон со стороны внешнего поля, $F_{ex} = q_0 E_0$, к внутриатомной силе $F_{at} = \langle \partial U / \partial r \rangle \approx \hbar \omega / a_B$.

В соответствии с отмеченными выше правилами симметрии матричные элементы переходов между состояниями одинаковой четности являются четными функциями $a(t)$, матричные элементы пере-

ходов между состояниями противоположной четности — нечетными функциями $a(t)$. При $a \rightarrow 0$ недиагональные матричные элементы стремятся к нулю, а диагональные — к единице, поскольку волновые функции $\Phi_n(\mathbf{r})$ являются ортонормированными.

14.2.3. Энергетические сдвиги. При решении системы уравнений (14.26) удобно выделить диагональные члены

$$\frac{da_n}{dt} = i\omega_n a_n - iM_{nn}a_n - i \sum_{m(\neq n)} M_{nm}a_m. \quad (14.57)$$

Как следует из (14.23), диагональные матричные элементы имеют вид

$$M_{nn} = \int \bar{\Phi}_n H \Phi_n dV,$$

т. е. они определяют квантово-механическое среднее оператора H по волновым функциям свободного атома. Оператор H в нерелятивистском приближении совпадает с гамильтонианом атома, взаимодействующего с внешним электромагнитным полем. Поскольку при $E_0 \ll E_{at}$ волновые функции краевой задачи (14.6) незначительно отличаются от волновых функций свободного атома, то в этом случае получаем

$$M_{nn} \approx \omega_n.$$

В общем случае диагональные матричные элементы имеют вид

$$M_{nn}(t) = \sum_p W_{np}^{-1}(t) \omega_p W_{pn}(t) = \sum_p \omega_p |W_{pn}(t)|^2. \quad (14.58)$$

Как видно, они содержат квазистационарную часть и компоненты, осциллирующие на частоте четных гармоник лазерного импульса. Учитывая (14.53), квазистационарную V_0 и осциллирующую V_ω части можно записать в следующем виде:

$$W_0(t) = J_0(\beta), \quad W_\omega(t) = \exp(-i\beta \cos \Phi) - J_0(\beta).$$

Матричные элементы квазистационарной части V_0 при использовании водородоподобных волновых функций могут быть вычислены в явном виде. Например,

$$\begin{aligned} \langle 1s|W_0|1s \rangle &= \frac{8 + \mu^2}{(4 + \mu^2)^{3/2}}, & \langle 1s|W_0|2s \rangle &= \frac{128\sqrt{2}\mu^2(9 + \mu^2)}{27(9 + 4\mu^2)^{5/2}}, \\ \langle 2s|W_0|2s \rangle &= \frac{2(8 + \mu^4 + 2\mu^6)}{16(1 + \mu^2)^{7/2}}, & \langle 2p, m = 0|W_0|2p, m = 0 \rangle &= \frac{8 - 8\mu^2 - \mu^4}{8(1 + \mu^2)^{7/2}}, \\ \langle 2p, m = \pm 1|W_0|2p, m = \pm 1 \rangle &= \frac{8 + 8\mu^2 + 3\mu^4}{8(1 + \mu^2)^{5/2}}. \end{aligned}$$

В длинноволновом приближении для квазистационарной части $M_{nm}^{(0)}$ составных матричных элементов получаем

$$M_{nm}^{(0)}(t) = \sum_p \left[(J_0(\beta))_{np} \omega_p (J_0(\beta))_{pm} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (J_k(\beta))_{np} \omega_p (J_k(\beta))_{pm} \right].$$

В случае взаимодействия атома с полем монохроматической волны квазистационарная часть матричных элементов от времени не зависит, поэтому для диагональных матричных элементов M_{nn} получаем

$$\int_0^t M_{nn}^{(0)}(t') dt' = \Omega_n t,$$

где

$$\Omega_n = \sum_p \omega_p \left[|(J_0(\beta))_{np}|^2 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} |(J_k(\beta))_{np}|^2 \right]. \quad (14.59)$$

В случае взаимодействия атома с лазерным импульсом, длительность которого существенно превосходит период оптических колебаний, $\tau_0 \gg T$, можно ввести мгновенную частоту

$$\Omega_n(t) = \frac{d\Phi_n(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_0^t M_{nn}^{(0)}(t') dt',$$

определяющую частоту в локальные моменты времени t_0 , поскольку

$$\exp(-i\Phi(t))|_{t \approx t_0} = \exp \left[-i \left(\Phi(t_0) + \frac{d\Phi(t_0)}{dt} (t - t_0) + \dots \right) \right],$$

в этом случае $\Omega_n(t)$ является медленно меняющейся функцией времени и зависит от формы профиля лазерного импульса.

На рис. 14.2 показана зависимость частот Ω_n от безразмерной амплитуды поля $\mu = q_0 A_0 a_B / \hbar c$ квазимонохроматической волны для ряда состояний водородоподобного атома. Несложно видеть, что с ростом напряженности поля лазерного импульса величина отношения $\hbar \Omega_n / E_n$ быстро падает и при напряженности поля порядка внутриатомной эффективная энергия уровня становится в несколько раз меньше энергии соответствующего уровня свободного атома. При дальнейшем росте напряженности поля эффективная энергия уровней стремится к ионизационному пределу. Наиболее медленный спад наблюдается для $1s$ -состояния, что указывает на относительную стабильность основного состояния атома водорода.

14.2.4. Матричные элементы ионизационных переходов.

Используя волновые функции сплошного спектра атома водорода, несложно рассчитать матричные элементы ионизационных переходов.

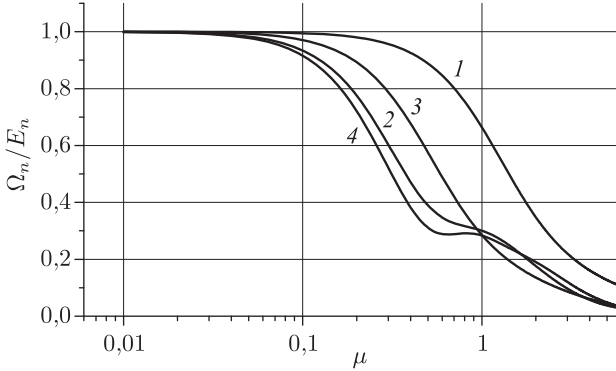


Рис. 14.2. Зависимость частот Ω_n от безразмерной напряженности поля μ , определяемой равенством (14.56): $n = 1s$ (1), $n = 2s$ (2), $n = 2p$, $m = 1$ (3), $n = 2p$, $m = 0$ (4)

Например, для матричных элементов переходов из основного состояния в состояние континуума с угловым моментом $l = 0$ и $l = 1$ получаем

$$\langle 1s|W|k, l = 0 \rangle = \frac{2k \exp(\pi/2k) |\Gamma(1-i/k)|}{ia} \times \\ \times \left(\frac{{}_2F_1\left(1+i/k, 2, 2, \frac{2ik}{1+ik-ia}\right)}{(1+ik-ia)^2} - \frac{{}_2F_1\left(1+i/k, 2, 2, \frac{2ik}{1+ik+ia}\right)}{(1+ik+ia)^2} \right),$$

$$\langle 1s|W|k, l = 1 \rangle = \frac{4\sqrt{3} k^2 \exp(\pi/2k) |\Gamma(2-i/k)|}{3!} \times \\ \times \left[\frac{\Gamma(3)}{ia} \left(\frac{{}_2F_1\left(2+i/k, 3, 4, \frac{2ik}{1+ik-ia}\right)}{(1+ik-ia)^3} + \frac{{}_2F_1\left(2+i/k, 3, 4, \frac{2ik}{1+ik+ia}\right)}{(1+ik+ia)^3} \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{a^2} \left(\frac{{}_2F_1\left(2+i/k, 2, 4, \frac{2ik}{1+ik-ia}\right)}{(1+ik-ia)^2} - \frac{{}_2F_1\left(2+i/k, 2, 4, \frac{2ik}{1+ik+ia}\right)}{(1+ik+ia)^2} \right) \right],$$

где k — величина волнового вектора ионизованного электрона, безразмерная умножением на боровский радиус a_B . Из представленных формул видно, что полуширина кривой определяется в основном условием $\Delta k a_B \approx 1$. На рис. 14.3 показана зависимость величины указанных матричных элементов как функций волнового вектора k для различных значений безразмерного параметра a . Из рисунков видно, что с ростом напряженности поля происходит незначительное увеличение полуширины кривых. При напряженности поля, приблизительно равной и превышающей внутриатомную, максимум матричных элементов достигается при $k \approx a$.

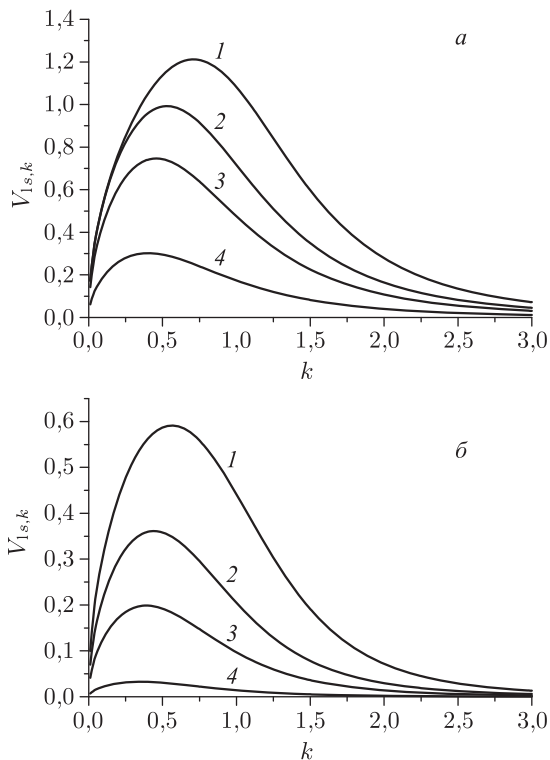


Рис. 14.3. Зависимость матричных элементов ионизационных переходов от величины волнового вектора ионизованного электрона для различных значений безразмерного параметра a , определяемого формулой (14.55): $a = 1$ (кривая 1), $0,7$ (кривая 2), $0,5$ (кривая 3), $0,2$ (кривая 4)

14.2.5. Учет эффектов пространственной дисперсии. Как следует из (14.53), вне рамок приближения чисто электрического взаимодействия величина отклика атома на частоте n -й гармоники поля определяется матричным элементом

$$K_{pq} = \left(J_n \left(\frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}_0(t) \mathbf{r} \right) \exp(in\mathbf{kr}) \right)_{pq}.$$

В случае водородоподобного атома эти матричные элементы могут быть вычислены аналитически. При этом удобно воспользоваться следующим соотношением:

$$K_{pq} = \sum_s \left(J_n \left(\frac{q_0}{\hbar c} \mathbf{A}_0(t) \mathbf{r} \right) \right)_{ps} (\exp(in\mathbf{kr}))_{sq}.$$

Матричные элементы от экспоненты близки по своей структуре матричным элементам оператора W . Например, выбирая систему координат

нат с осью z , совпадающей по направлению с вектором \mathbf{A}_0 , и осью y — вдоль вектора \mathbf{k} , получаем

$$\begin{aligned}\langle 1s | \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) | 1s \rangle &= \frac{16}{(4 + (ka_B)^2)^2}, \\ \langle 1s | \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) | 2s \rangle &= \frac{256\sqrt{2} (ka_B)^2}{(9 + 4(ka_B)^2)^3}, \\ \langle 1s | \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) | 2p, m = \pm 1 \rangle &= m \frac{128\sqrt{6} ka_B}{(9 + 4(ka_B)^2)^3}.\end{aligned}$$

Основное отличие матричных элементов K_{pq} от матричных элементов в приближении чисто электрического взаимодействия заключается в следующем: становятся неравными нулю матричные элементы с $\Delta m \neq 0$, что обусловлено тем, что $\mathbf{k}\mathbf{r} = kr \sin \theta \sin \varphi$. Матричные элементы с $\Delta m \neq 0$ в приближении чисто электрического взаимодействия тождественно равны нулю ввиду аксиальной симметрии оператора W в этом случае.

Как мы уже отмечали выше, исходя из общих соображений учет пространственного изменения поля электромагнитной волны вносит поправки, определяющиеся величиной параметра ka_B , т. е. отношением боровского радиуса к длине волны излучения. При взаимодействии атома с излучением, резонансным переходу $1s \leftrightarrow 2p$ атома водорода, получаем: $ka_B \approx 3 \cdot 10^{-3}$. Для излучения видимого диапазона эти поправки становятся меньше еще на порядок. Таким образом, в нерелятивистской области напряженности поля лазерной волны учет указанных поправок не приводит к заметному изменению спектра отклика атома.

14.2.6. Циркулярная поляризация. В случае циркулярной поляризации оператор W имеет вид

$$W = \exp \left[-i \frac{q_0}{\hbar c} A_0(t) r \sin \theta \cos(\omega_0 t - \varphi) \right]. \quad (14.60)$$

Как видно из (14.60), легко определяются матричные элементы для собственных функций оператора проекции углового момента, $l_z u_m(\varphi) = m u_m(\varphi)$, которые являются частью сферических функций. Соответствующие матричные элементы имеют вид

$$\langle m_1 | W | m_2 \rangle = J_{m_2 - m_1} \left(\frac{q_0}{\hbar c} A_0 r \sin \theta \right) \exp [i(m_2 - m_1)(\omega_0 t - \pi/2)].$$

Таким образом, гармоники отклика атома однозначно связаны с изменением проекции углового момента $\Delta m = m_2 - m_1$, поэтому если лазерный импульс взаимодействует с атомом, находящимся в основном состоянии, то максимальный номер гармоники отклика определяется законом спадания матричных элементов с ростом углового момента состояния.

Некоторые матричные элементы оператора (14.60) для состояний атома водорода представлены ниже:

$$\begin{aligned}\langle 1s|W|1s\rangle &= \frac{16}{(4 + \mu^2)^2}, \quad \langle 2s|W|2s\rangle = \frac{1 - 3\mu^2 + 2\mu^4}{(1 + \mu^2)^4}, \\ \langle 1s|W|2p, m = 0\rangle &= 0, \quad \langle 2p, m = 0|W|2p, m = 0\rangle = \frac{1}{(1 + \mu^2)^3}, \\ \langle 2p, m = \pm 1|W|2p, m = \pm 1\rangle &= \frac{1 - 2\mu^2}{(1 + \mu^2)^4},\end{aligned}$$

где μ определено равенством (14.56). Матричные элементы (14.2.6) отвечают правилу отбора $\Delta m = 0$, поэтому не содержат зависимости от частоты поля. Приведем ряд матричных элементов с $\Delta m > 0$:

$$\begin{aligned}\langle 1s|W|l = 1, m = 1\rangle &= \frac{384\mu}{(9 + 4\mu^2)^3} \exp(i\omega_0 t), \\ \langle 1s|W|l = 2, m = 2\rangle &= \frac{10368\mu^2}{(16 + 9\mu^2)^4} \exp(i2\omega_0 t), \\ \langle 1s|W|l = 3, m = 3\rangle &= \frac{327680\mu^3}{(25 + 16\mu^2)^5} \exp(i3\omega_0 t).\end{aligned}$$

Как будет показано ниже, в одноуровневом приближении спектр поля отклика определяется матричными элементами $\mathbf{P}_{1s,1s}$. Учитывая, что правила отбора для матричных элементов оператора W не зависят от состояния поляризации лазерной волны, спектр отклика будет представлять собой последовательность нечетных гармоник частоты лазерного импульса.

14.3. Спектр отклика атома

14.3.1. Одноуровневое приближение. Кардинальное отличие спектра отклика атома, рассчитываемого на основе использования собственных функций краевой задачи (14.6), от спектров, рассчитываемых на основе традиционных подходов, состоит в том, что спектр отклика даже в одноуровневом приближении зависит от параметров лазерного импульса. Одноуровневое приближение соответствует случаю, когда населенность основного состояния $|a_0(t)|^2$ существенно превосходит населенность всех остальных уровней, т. е. $|a_0(t)|^2 \gg |a_n(t)|^2$, где $n > 0$. Очевидно, что указанное приближение применимо в широком диапазоне параметров лазерного импульса в случае, когда энергия фотона много меньше энергии перехода между основным и первым возбужденным уровнем атома: $\hbar\omega \ll E_1 - E_0$. Это соотношение выполняется, например, для водородоподобного атома, находящегося в основном со-

стоянии и взаимодействующего с излучением видимого диапазона, ИК- и радиочастотным полем, поскольку $E_{2p} - E_{1s} \approx 10$ эВ. Тем не менее экспериментальные данные однозначно свидетельствуют о том, что диэлектрическая проницаемость газа водородоподобных атомов в указанных диапазонах не равна единице. В общем случае условие применимости указанного приближения зависит от параметров лазерного импульса (напряженности поля, несущей частоты и длительности). Однако очевидно, что при существенно субатомных значениях напряженности поля внешней волны, относящихся к указанному диапазону спектра электромагнитных волн, населенность всех уровней атома, за исключением основного, практически равна нулю. Следовательно, поле отклика атома должно быть отлично от нуля даже в рамках одноуровневого приближения, когда мы можем пренебречь населенностью всех уровней, кроме основного.

Отметим, что традиционный подход, основанный на использовании электродипольного приближения, не дает возможности рассчитать отклик атома в указанных условиях без привлечения переходов электрона между различными состояниями свободного атома. Однако использование волновых функций краевой задачи (14.6) в качестве базисных волновых функций разложения волновой функции задачи (14.20) позволяет нам легко рассчитать отклик атома в одноуровневом приближении.

Остановимся на обсуждении спектров отклика атома, взаимодействующего с лазерным импульсом следующего вида:

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_0^2}\right) \cos \omega_0 t. \quad (14.61)$$

В одноуровневом приближении решение системы уравнений (14.25) имеет вид

$$a_0(t) = a_0(0) \exp\left(i\omega_0 t - i \sum_m \int W_{0m}^{-1} \omega_m W_{m0} dt\right),$$

следовательно,

$$|a_0(t)|^2 = |a_0(0)|^2 = 1$$

и для спектра интенсивности отклика из (14.43) получаем

$$\frac{dI(\mathbf{k}, \omega)}{d\Omega} = \frac{q^2}{2\pi c m^2} \left| \sum_{n,m} \int W_{0n}^{-1}(t) [\mathbf{k} \mathbf{p}_{nm}] W_{m0}(t) \exp(i\omega t) dt \right|^2. \quad (14.62)$$

Пусть в начальный момент времени атом находится в основном состоянии, запишем сумму в выражении (14.62) с учетом нескольких низших состояний:

$$\begin{aligned} \sum_{n,m} W_{0n}^{-1} \mathbf{p}_{nm} W_{m0} &= W_{1s,1s}^{-1} \mathbf{p}_{1s,2p} W_{2p,1s} + W_{1s,1s}^{-1} \mathbf{p}_{1s,3p} W_{3p,1s} + \\ &+ W_{1s,2s}^{-1} \mathbf{p}_{2s,3p} W_{3p,1s} + \dots \end{aligned} \quad (14.63)$$

Исходя из вида матричных элементов оператора W все три слагаемых в (14.63) дают отклик в виде последовательности нечетных гармоник частоты лазерного поля. На рис. 14.4 представлен спектр отклика атома, взаимодействующего с лазерным импульсом с параметрами $\omega_0\tau_0 = 100$ и безразмерной амплитудой поля $\mu = q_0A_0a_B/\hbar c = 0,1$ (а), 0,5 (б), 1,0 (в), 2,0 (д). Из рисунка видно, что возрастание амплитуды поля приводит к последовательному возрастанию числа гармоник в спектре отклика атома.

На рис. 14.5, а показан спектр отклика атома, взаимодействующего с лазерным импульсом профиля (14.61) при $\omega_0\tau_0 = 5$ и $\mu = 2$, а на рис. 14.5, б — спектр отклика атома при тех же параметрах лазерного импульса, но с заменой косинуса на синус в формуле (14.61). Временные профили соответствующих импульсов показаны на рис. 14.5, в, г, а их спектры показаны на рис. 14.5, а, б штриховыми линиями. Несмотря

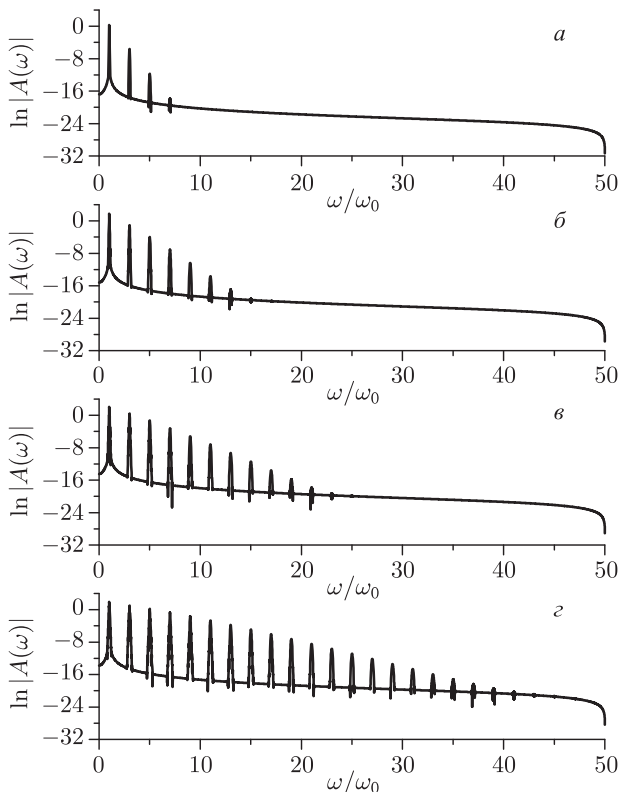


Рис. 14.4. Спектр отклика атома, взаимодействующего с лазерным импульсом с параметрами $\omega_0\tau_0 = 100$ и безразмерной амплитудой поля $\mu = qA_0a_B/\hbar c = 0,1$ (а), 0,5 (б), 1,0 (в), 2,0 (г)

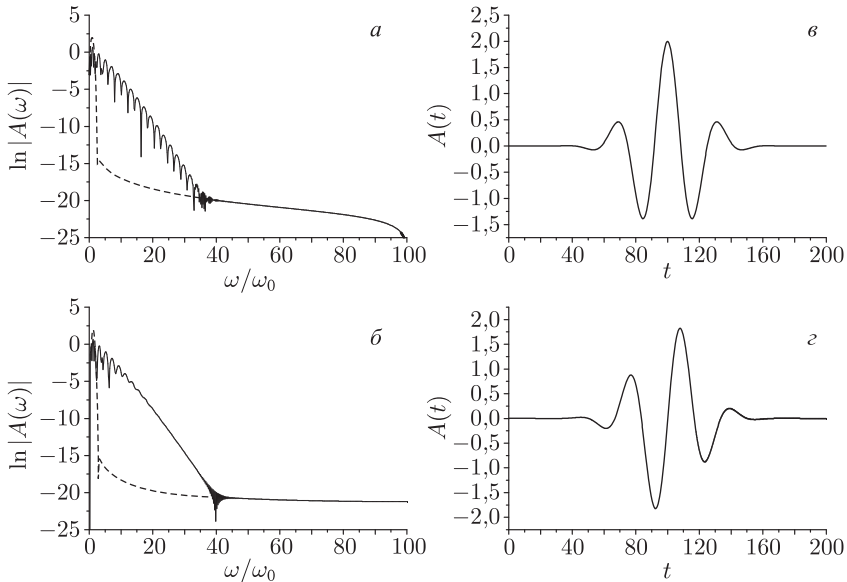


Рис. 14.5. Спектр отклика атома, взаимодействующего с лазерным импульсом профиля (14.63) при $\omega_0\tau_0 = 5$ и $\mu = 2$ (а), спектр отклика атома при тех же параметрах лазерного импульса, но с заменой косинуса на синус в формуле (14.61) (б). Временные профили соответствующих импульсов показаны на рис. в и з, а их спектры — на рис. а и б штриховыми линиями

ря на одинаковое значение интегральной спектральной ширины отклика, в спектре отклика атома, взаимодействующего с импульсом четного временного профиля, отчетливо наблюдается последовательность нечетных гармоник отклика, в то время как отклик атома, взаимодействующего с импульсом нечетного временного профиля, имеет вид спектра генерации квазиконтинуума. Таким образом, спектр отклика атома, взаимодействующего с ультракороткими лазерными импульсами, зависит не только от напряженности, длительности и несущей частоты импульса, но и от детальной структуры его временного профиля, т. е. фазы импульса. Отметим, что для импульсов с $\omega_0\tau_0 \gg 1$ спектр отклика атома практически не зависит от относительной фазы поля лазерного импульса.

Итак, мы видим, что уже в рамках одноуровневого приближения спектр отклика атома представляет собой последовательность нечетных гармоник частоты лазерного импульса. При этом число гармоник в спектре отклика атома монотонно растет с ростом напряженности поля лазерного импульса. Такое поведение спектра отклика атома может быть предсказано исходя из проведенного выше анализа симметричных свойств матричных элементов. Действительно, в одноуровневом приближении поле отклика атома определяется матричными элементами

$\mathbf{P}_{00} = \sum_{n,m} W_{0n}^{-1} \mathbf{P}_{nm} W_{m0}$ и, поскольку матричные элементы оператора импульса \mathbf{P}_{nm} отличны от нуля лишь для переходов между состояниями противоположной четности, то

$$\mathbf{P}_{00} = i \sum_{n,m} \left(W_{0n}^{(o)} \mathbf{P}_{nm} W_{m0}^{(e)} - W_{0n}^{(e)} \mathbf{P}_{nm} W_{m0}^{(o)} \right).$$

Следовательно, отклик атома в соответствии с (14.54) может быть лишь последовательностью нечетных гармоник. В одноуровневом приближении поле отклика атома не зависит ни от величины составных матричных элементов $M_{nm}(t)$, ни от частот $\Omega_n(t)$, задаваемых (14.59), что показывает общность механизма отклика атома при субатомной напряженности поля лазерной волны. При качественно одинаковом характере спектра отклика атома количественные отличия могут быть связаны лишь с характеристиками начального состояния атома. Действительно, как следует из приведенного выше обсуждения матричных элементов, изменение радиального квантового числа и углового момента состояния приводит не только к различию коэффициентов соответствующих нелинейных зависимостей, но и к изменению характера нелинейности. Действительно, приведенные выше формулы для матричных элементов существенно зависят от величины квантовых чисел. Например,

$$\langle n_1, l_1, m_1 = 0 | W | n_2, l_2, m_2 = 0 \rangle = \frac{Q \left(n \left(n_r^{(1)} + n_r^{(2)} \right), a(t) \right)}{\left(1 + (n_1 n_2 a(t) / (n_1 + n_2))^2 \right)^{n_1 + n_2}},$$

где n_i и $n_r^{(i)}$ — главное и радиальное квантовые числа, а $Q(n, a)$ — полином a степени n (степень полинома n зависит от значения полусуммы радиальных квантовых чисел). Этот полином может быть выражен через сумму гипергеометрических рядов, однако ввиду громоздкости соответствующих формул мы их здесь не приводим. Общие формулы зависят также и от величины проекции углового момента начального и конечного состояний m_i . Тем не менее уже из приведенной формулы видно, что количественные характеристики отклика атома зависят от значений квантовых чисел, определяющих его начальное состояние.

14.3.2. Теория возмущений. В рамках одноуровневого приближения мы пренебрегаем населенностью всех уровней за исключением основного. Как мы отмечали выше, это приближение заведомо применимо в области субатомных значений напряженности поля лазерного импульса. Повышение напряженности внешнего поля приводит к тому, что населенности остальных уровней, оставаясь малыми, принимают конечные значения. В этом случае мы можем воспользоваться методами теории возмущений, основное предположение которой состоит в следующем:

$$|a_{n(\neq 0)}(t)| \ll |a_0(t)|.$$

Тогда из (14.25) получаем

$$b_n(t) = -ib_0 \int_0^t M_{n0}(t') \exp[i(\Omega_n - \Omega_0)t'] dt'. \quad (14.64)$$

Подставляя (14.64) в (14.42), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_r(\omega) = & \frac{q_0}{Rm_0c} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\mathbf{P}_{00}(t) + i \sum_n \int_0^t M_{0n}(t') \mathbf{P}_{n0}(t) \exp[i(\Omega_n - \Omega_0)(t - t')] dt' - \right. \\ & \left. - i \sum_n \int_0^t \mathbf{P}_{0n}(t) M_{n0}(t') \exp[-i(\Omega_n - \Omega_0)(t - t')] dt' \right] \exp(i\omega t) dt. \end{aligned} \quad (14.65)$$

Первое слагаемое в правой части (14.65) совпадает с откликом в одноуровневом приближении, поэтому это слагаемое дает отклик лишь на частоте нечетных гармоник частоты лазерного импульса.

Отклик, описываемый вторым слагаемым в правой части (14.65), определяется симметричными свойствами матричных элементов $\sum_n \mathbf{P}_{0n} M_{n0}$. Сомножители в сумме по состояниям четности, совпадающей с четностью основного состояния $p_n = p_0$, имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0n} &= i \sum_{pq} \left(W_{0p}^{(o)} \mathbf{P}_{pq} W_{qn}^{(e)} - W_{0p}^{(e)} \mathbf{P}_{pq} W_{qn}^{(o)} \right) = \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathbf{P}_{0n}^{(2k+1)} \exp[-i(2k+1)\omega_0 t], \\ M_{n0} &= \sum_p \left(W_{np}^{(e)} \omega_p W_{p0}^{(e)} + W_{np}^{(o)} \omega_p W_{p0}^{(o)} \right) = \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} M_{n0}^{(2k)} \exp[-i2k\omega_0 t]. \end{aligned} \quad (14.66)$$

Сомножители в сумме по состояниям с $p_n = -p_0$ имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0n} &= \sum_{pq} \left(W_{0p}^{(e)} \mathbf{P}_{pq} W_{qn}^{(e)} + W_{0p}^{(o)} \mathbf{P}_{pq} W_{qn}^{(o)} \right) = \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathbf{P}_{0n}^{(2k)} \exp[-i2k\omega_0 t], \\ M_{n0} &= i \sum_p \left(W_{np}^{(o)} \omega_p W_{p0}^{(e)} - W_{np}^{(e)} \omega_p W_{p0}^{(o)} \right) = \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} M_{n0}^{(2k+1)} \exp[-i(2k+1)\omega_0 t]. \end{aligned} \quad (14.67)$$

Таким образом, второе и третье слагаемые в правой части (14.65) при суммировании по состояниям произвольной четности приводят к отклику лишь на частоте нечетных гармоник частоты лазерного импульса. Подставляя вышеприведенные формулы в (14.65) и полагая, что атом взаимодействует с полем монохроматической волны, для спектра поля отклика получаем

$$\mathbf{A}_r(\omega) = \frac{2\pi q_0}{Rm_0c} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\mathbf{P}_{00}^{(2k+1)} + 2 \sum_{k'=-\infty}^{\infty} \left(\sum_{n(p_n=p_0)} \frac{\mathbf{P}_{0n}^{(k-k'+1)} M_{n0}^{(k+k')}}{(k+k')\omega_0 - \Omega_{n0}} + \sum_{n(p_n=-p_0)} \frac{\mathbf{P}_{0n}^{(k-k')} M_{n0}^{(k+k'+1)}}{(k+k'+1)\omega_0 - \Omega_{n0}} \right) \right] \delta(\omega - (2k+1)\omega_0), \quad (14.68)$$

где $\Omega_{n0} = \Omega_n - \Omega_0$.

Как видно, первое слагаемое в (14.68) совпадает со спектром, рассчитываемым в рамках одноуровневого приближения. В этом случае отклик атома связан лишь с деформацией волновой функции основного состояния атома под действием внешнего электромагнитного поля, т. е. отклик обусловлен отличием волновых функций $u_n(\mathbf{r}) \exp\left(i\frac{q}{\hbar c}\mathbf{A}\mathbf{r}\right)$ от волновых функций $u_n(\mathbf{r})$. Поскольку электрон не совершает переходов между различными состояниями атома, то спектр отклика не зависит от соотношения частоты лазерной волны и частот переходов атома.

Второе слагаемое в (14.68) связано с учетом переходов электрона между состояниями, соответствующими волновым функциям $u_n(\mathbf{r})$. Как мы отмечали выше, в присутствии внешнего электромагнитного поля эффективная энергия этих состояний зависит от напряженности поля (см. рис. 14.2), поэтому резонансные знаменатели зависят от соотношения частоты гармоник поля и частот Ω_{n0} . Таким образом, возникающие резонансы являются нелинейными в том смысле, что $\Omega_{n0} = \Omega_{n0}(A_0)$.

Как мы видели в предыдущем разделе, первое слагаемое в (14.68) приводит почти к экспоненциальному спаду амплитуды гармоник по мере роста их номера, а от амплитуды поля зависит лишь инкремент спада. Наличие резонансных знаменателей во втором слагаемом существенно изменяет соотношение амплитуд гармоник и приводит к появлению плато, т. е. области замедленного спадания амплитуд гармоник. Ширина этой области, как следует из (14.68), определяется $(\Omega_{n0})_{\max}$ (индекс «max» означает, что в качестве состояния n выбирается состояние, для которого достигает максимума произведение $\mathbf{P}_{0n} M_{n0}$ при резонансном значении знаменателя). Учитывая выражение (14.59) для частот Ω_n , несложно определить качественный характер зависимости частоты отсечки от амплитуды поля. Согласно (14.59) $\Omega_n = f_n(\mu^2)$, где μ определяется равенством (14.56). Следовательно, в полях субатомной напряженности:

$$(\Omega_{n0})_{\max} \approx a + b\mu^2, \quad (14.69)$$

где a и b — постоянные коэффициенты. Пондеромоторным потенциалом поля называется постоянная часть квадратичного по полю слагаемого уравнения (14.19)

$$U_p = \frac{q_0^2 A_0^2}{4m_0 c^2}.$$

Используя (14.56), получаем

$$\mu^2 = \frac{q_0^2 A_0^2 a_B^2}{\hbar^2 c^2} = U_p \frac{4\hbar^2}{m_0 q^4} = \frac{4U_p}{Ry}, \quad (14.70)$$

где Ry — единица атомной энергии (*ридберг*). Таким образом, в полях субатомной напряженности ширина плато линейно растет с ростом пондеромоторного потенциала. Это обусловлено следующими причинами. Во-первых, как видно из рис. 14.2, в субатомной области напряженностей лазерной волны разность $\Omega_{2p(2s)} - \Omega_{1s}$ растет с ростом напряженности поля, поэтому коэффициент b в субатомной области энергий является положительным. Во-вторых, как видно из рис. 14.1, недиагональные элементы оператора W , входящие в произведение $\mathbf{P}_{0n} M_{n0}$, в субатомной области растут с ростом напряженности поля, а резонанс согласно (14.68) достигается при $k + k' = \Omega_{n0}/\omega_0$, т.е. номер максимальной гармоники растет с ростом A_0 (такое поведение демонстрирует, например, рис. 14.4). Исходя из указанного поведения матричных элементов W_{n0} и частот Ω_{n0} можно предсказать, что ширина плато будет достигать максимума в области напряженности поля лазерной волны порядка внутриатомной, поскольку здесь достигают максимума как величина недиагональных элементов оператора W (рис. 14.1), так и разность $\Omega_n - \Omega_0$ (рис. 14.2).

14.3.3. Двухуровневое приближение. Итак, мы видим, что при учете движения населенности уровней в отклике атома появляются резонансные зависимости. Если условия резонанса выполняются достаточно точно, то населенность резонансного уровня может сравняться с населенностью основного состояния. В этом случае мы можем воспользоваться двухуровневым приближением, т.е. записать систему уравнений (14.57) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{db_0}{dt} &= -iM'_{00}(t)b_0 - iM_{01}(t) \exp(-i\Omega_{10}t) b_1, \\ \frac{db_1}{dt} &= -iM'_{11}(t)b_1 - iM_{10}(t) \exp(i\Omega_{10}t) b_0, \\ \frac{db_n}{dt} &= -i \sum_{m=0,1} M_{nm}(t) \exp(i\Omega_{nm}t) b_m, \end{aligned} \quad (14.71)$$

где индексом «0» обозначено основное состояние, индексом «1» состояние, для которого выполняется резонанс, например на несущей частоте лазерного импульса ($\Omega_{10} = \Omega_1 - \Omega_0 \approx \omega_0$), а индексом « n » — все остальные состояния. Отметим, что при интегрировании по периоду

времени, превышающему период оптических колебаний, интеграл

$$\int_0^t M'_{nn}(t') dt'$$

обращается в нуль, если атом взаимодействует с монохроматической волной. Поэтому соответствующее слагаемое в последних уравнениях системы (14.71) опущено.

Остановимся на анализе первых двух уравнений (14.71). Пусть резонансные уровни «1» и «0» имеют противоположную четность. В этом случае согласно проведенному выше анализу

$$\begin{aligned} M'_{11}(t) &= \sum_{k(\neq 0)} M_{11}^{(2k)} \exp(-i2k\omega_0 t), \\ M_{10}(t) &= \sum_{k(\neq 0)} M_{10}^{(2k+1)} \exp(-i(2k+1)\omega_0 t). \end{aligned}$$

Представим амплитуды в виде разложения:

$$b_{1(0)}(t) = \sum_k b_{1(0)}^{(k)}(t) \exp(-ik\omega_0 t). \quad (14.72)$$

Тогда, пользуясь резонансным приближением, получаем

$$\frac{db_{1(0)}^{(k)}}{dt} = ik\omega_0 b_{1(0)}^{(k)} - i \sum_{k'(\neq 0)} M_{11(00)}^{(2k')} b_{1(0)}^{(k-2k')} - i \sum_{k'} M_{10(01)}^{(2k'\pm 1)} b_{0(1)}^{(k-2k')}. \quad (14.73)$$

Из этой системы уравнений видно, что в резонансном приближении связанными друг с другом являются по отдельности четные и нечетные коэффициенты разложений (14.72). В случае взаимодействия атома с монохроматической волной система уравнений (14.73) является системой уравнений с постоянными коэффициентами, поэтому, ограничиваясь конечным числом слагаемых в сумме (14.72), мы можем всегда найти точное решение этой системы уравнений. Отметим, что при начальных условиях $b_0(0) = 1$ и $b_1(0) = 0$ решения в виде рядов (14.72) содержат только четные гармоники k .

Определив решение первых двух уравнений системы (14.71), мы можем легко найти решение оставшихся уравнений. Подставляя полученное решение в (14.42), для спектра поля отклика атома получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_r(\omega) &= \sum_{m, m'=0, 1} \int [b_m^*(t) b_{m'}(t) \mathbf{P}_{mm'}(t) + \\ &+ i \sum_n \int_0^t (M_{mn}(t') \mathbf{P}_{nm'}(t) b_m^*(t') b_{m'}(t) \exp(i\Omega_{nm}t - i\Omega_{nm}t') - \\ &- \mathbf{P}_{mn}(t) M_{nm'}(t') b_m^*(t) b_{m'}(t') \exp(i\Omega_{nm}t' - i\Omega_{nm}t)) dt'] \exp(i\omega t) dt. \end{aligned} \quad (14.74)$$

Учитывая приведенные выше симметричные свойства матричных элементов \mathbf{P}_{nm} и M_{nm} , несложно видеть, что в случае взаимодействия атома с монохроматической волной отклик (14.74) содержит только нечетные гармоники частоты электромагнитного поля.

Если резонанс осуществляется на несущей частоте поля для перехода с $p_1 = p_0$, то связанными оказываются четные гармоники разложения (14.72) для коэффициента b_0 и нечетные гармоники разложения коэффициента b_1 . С учетом симметричных свойств матричных элементов переходов, несложно показать, что отклик также является последовательностью нечетных гармоник.

Таким образом, при взаимодействии атома с монохроматической волной в условиях точного резонанса $\Omega_{10} = \omega_0$ отклик атома является последовательностью нечетных гармоник поля, вне зависимости от того является ли переход разрешенным или запрещенным. Это связано с тем, что, например, в случае $p_1 = -p_0$

$$\frac{1}{T} \int_0^T M_{10}(t') \exp(i\Omega_{10}t') b_0 \exp(ik\omega_0t') dt' = \sum_{k', k''} M_{10}^{(2k'+1)} b_0^{(k'')} \delta_{k, k''+2k'}.$$

Однако если атом взаимодействует с полем лазерного импульса, то результат усреднения первых двух уравнений (14.71) по периоду оптических колебаний принимает вид

$$\begin{aligned} & \frac{1}{T} \int_t^{t+T} M_{10}(t') \exp(i\Omega_{10}t') b_0 \exp(ik\omega_0t') dt' = \\ & = \sum_{k', k''} M_{10}^{(2k'+1)} b_0^{(k'')} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \exp[i(k-2k'-k'')\omega_0t' + i(\Omega_{10}(t) - \omega_0)t'] dt'. \end{aligned}$$

Таким образом, если сдвиг уровней $\Delta\Omega_{10} = \Omega_{10}(t) - \Omega_{10}(0)$ превосходит спектральную ширину лазерного импульса $\Delta\omega = 2\pi/\tau_0$, то на фронте импульса могут оказаться связанными четные гармоники разложения (14.72) амплитуд $b_1(t)$ и $b_0(t)$, а в теле импульса — нечетные гармоники. В этом случае в интегральном отклике атома будут присутствовать как четные, так и нечетные гармоники несущей частоты лазерного импульса, соотношение между которыми будет зависеть как от энергии, так и от длительности лазерного импульса.

14.3.4. Нелинейно-оптический отклик атома в лазерном поле.

Проведенный выше анализ показал, что с ростом напряженности поля лазерной волны происходит существенное изменение характера отклика атома. Если при невысокой напряженности поля лазерной волны спектр отклика атома определяется матричными элементами \mathbf{r}_{nm} , то с ростом напряженности поля основную роль начинают играть матричные элементы оператора W , которые, как показано выше, яв-

ляются существенно нелинейными функциями напряженности поля лазерного импульса. Матричные элементы W_{nm} являются функциями безразмерного параметра μ , определяемого выражением (14.56) и равного отношению силы, действующей на электрон со стороны внешнего поля qE_0 , к внутриатомной силе $F_{at} = \langle \partial U / \partial r \rangle \approx \hbar\omega/a_B$. Недиагональные матричные элементы W_{nm} достигают максимума при $\mu \approx 1$, а диагональные матричные элементы существенно уменьшаются при $\mu \rightarrow 1$. Матричные элементы W_{nm} являются коэффициентами разложения волновой функции атома, взаимодействующего с полем лазерной волны, по собственным функциям невозмущенного атома (см. (14.13) и (14.16)). Следовательно, при стремлении напряженности поля лазерной волны к внутриатомной волновая функция $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ (являющаяся волновой функцией атома, взаимодействующего с электромагнитным полем), отвечающая состоянию с энергией E_n свободного атома, является суперпозицией все большего числа волновых функций свободного атома $\Phi_m(\mathbf{r})$ и основной вклад в $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ дают функции $\Phi_m(\mathbf{r})$ с $m \neq n$. Такое поведение матричных элементов приводит к тому, что при напряженности поля порядка внутриатомной правила отбора для матричных элементов $(W^{-1}H_0W)_{nm}$, входящих в систему уравнений (14.25), начинают существенно отличаться от правил отбора для матричных элементов гамильтониана электродипольного приближения $(H_0 - \mathbf{E}\mathbf{d})_{nm}$. Действительно, при $E_0 \ll E_{at}$ получаем

$$\begin{aligned} (V^{-1}H_0V)_{nm} &= \sum_p \left(1 + i\frac{q}{\hbar c}\mathbf{A}\mathbf{r} + \dots\right)_{np} E_p \left(1 - i\frac{q}{\hbar c}\mathbf{A}\mathbf{r} + \dots\right)_{pm} = \\ &= E_n\delta_{nm} - i\omega_{nm}\frac{q}{c}(\mathbf{A}\mathbf{r})_{nm} + \dots \end{aligned} \quad (14.75)$$

С другой стороны,

$$(H_0 - \mathbf{E}\mathbf{d})_{nm} = E_n\delta_{nm} - q(\mathbf{E}\mathbf{r})_{nm}. \quad (14.76)$$

Учитывая равенство $\mathbf{E}\omega = -(1/c)(\partial\mathbf{A}\omega/\partial t) = (i\omega/c)\mathbf{A}\omega$, мы видим, что в квазирезонансном приближении $\omega_{nm} \approx \omega$ выражение (14.75) совпадает с (14.76). Сравнивая (14.75) с (14.76), мы можем сделать следующие выводы. Во-первых, при субатомной напряженности поля лазерного импульса гамильтониан электродипольного взаимодействия качественно верно описывает характер отклика атома. Во-вторых, длинноволновое приближение не эквивалентно электродипольному приближению, поскольку многоточие в формуле (14.75) включает матричные элементы более высоких степеней произведения $\mathbf{A}(t)\mathbf{r}$. В-третьих, матричные элементы (14.75), в отличие от (14.76), являются нелинейными функциями напряженности поля и, как следует из формул раздела 14.2, их величина начинает падать с ростом E_0 в области $E_0 > E_{at}$. Следовательно, спектр отклика атома будет насыщаться в случае, если напряженность лазерного импульса превышает величину внутриатомной напряженности. Действительно, рост напряженности

поля на фронте падающего лазерного импульса приводит к тому, что все большее количество энергетических состояний атома вовлекается в процесс формирования его отклика. Однако когда напряженность поля лазерного импульса начинает превышать внутриатомную, то это не приводит к увеличению числа состояний, дающих вклад в отклик атома. В результате ширина спектра отклика атома перестает расти. Ясно, что форма спектра отклика продолжает меняться, поскольку соотношение между величиной частот Ω_n , определяемых соотношением (14.59), немонотонно зависит от напряженности поля. С учетом того что в теле импульса (где $E_0 > E_{at}$) частоты $\Omega_{nm} = \Omega_n - \Omega_m$ стремятся к нулю, спектр атома согласно (14.68) и (14.74) из квазиэквидистантного преобразуется в спектр квазиконтинуума.

Итак, основные различия режимов взаимодействия атома с лазерным полем внутриатомной напряженности и с субатомными полями состоят в следующем. Во-первых, спектр отклика атома перестает иметь вид последовательности нечетных гармоник частоты лазерного поля, имеющих вид плато с четко выраженной частотой отсечки. При напряженности поля порядка внутриатомной спектр излучения принимает скорее вид квазиконтинуума, т. е. пьедестала с последовательностью нечетко выраженных максимумов. Положения максимумов сдвинуты относительно положения нечетных гармоник, а также появляются максимумы вблизи четных гармоник лазерного поля. Тем не менее в спектре проявляется наличие частоты отсечки, зависящей от напряженности поля лазерного импульса. Во-вторых, величина частоты отсечки перестает линейно расти с интенсивностью лазерного поля и выходит на насыщение. В-третьих, скорость ионизации при напряженности поля порядка внутриатомной перестает расти с ростом напряженности поля и также выходит на насыщение.

Такое поведение спектров отклика и ионизации имеет двоякую причину. Во-первых, при субатомной напряженности лазерного поля спектр отклика атома определяется в основном центральной симметрией внутриатомного поля, которая диктует появление лишь нечетных гармоник частоты лазерного поля в спектре отклика атома. При напряженности поля порядка внутриатомной симметрия полной системы, включающей атом и внешнее поле, перестает быть центральной, и в длинноволновом приближении становится аксиальной. Это приводит к изменению правил отбора, характерных для спонтанного излучения атома, которые в той или иной степени отражаются на спектре отклика атома, взаимодействующего с полем лазерной волны субатомной напряженности. Во-вторых, при напряженности поля порядка внутриатомной спектр отклика атома начинает все в большей степени определяться нелинейными параметрическими процессами, приводящими к появлению суммы по k' в формуле (14.68). Действительно, с ростом напряженности поля все большее число уровней вовлекается в процесс отклика атома. При этом энергия каждого из уровней испытывает сдвиг в поле лазерной волны, величина которого зависит от мгно-

венного значения интенсивности лазерного импульса. Поэтому, в отличие, например, от классической картины надпороговой ионизации в субатомных полях, где энергия ионизованных электронов с хорошей точностью подчиняется закону $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n\hbar\omega - I$, где I — энергия ионизации атома, а $\hbar\omega$ — энергия кванта лазерного поля, при напряженности поля порядка внутриатомной выражение для энергии ионизованных электронов принимает вид: $E_n(|E_0|^2) = E_n + \Delta E_n(|E_0|^2)$, где $|E_0|^2$ — интенсивность поля лазерной волны. Указанные два фактора являются доминирующими в области напряженности лазерного поля от внутриатомной до релятивистской. В релятивистской области напряженностей лазерной волны появляются дополнительные факторы, связанные с влиянием магнитного поля волны на движение электрона и эффектами пространственной дисперсии. Следовательно, симметрия полной системы перестает быть аксиальной, что неизбежно приводит к дальнейшей трансформации спектра отклика атома.

Глава 15

АТОМ ВОДОРОДА

Как мы отмечали ранее, спектры, рассчитанные на основе решения задачи о движении спинорной частицы в кулоновском поле, могут служить лишь нулевым приближением реальных спектров водородоподобных атомов или ионов. Действительно, учет конечности массы и наличия собственных магнитного и электрического моментов ядра приводит к сдвигам и расщеплению уровней. Расчет стационарных состояний атомоподобной системы, состоящей даже из двух частиц, взаимодействующих посредством электромагнитного поля, представляет собой крайне сложную математическую проблему. Вместе с тем успехи, достигнутые в развитии методов прецизионной лазерной спектроскопии, позволяют надежно регистрировать сверхтонкую структуру атомных спектров, обусловленную двухчастичными взаимодействиями. В настоящей главе будет получено уравнение для двухчастичной волновой функции, которое включает операторы сверхтонких взаимодействий. Однако решение указанного уравнения может быть получено лишь при использовании ряда приближений. Одно из основных приближений состоит в малости энергии связи электрона по сравнению с энергией покоя электрона и ядра, поэтому рассчитываемые поправки относятся лишь к состояниям стандартного спектра состояний водородоподобного атома.

15.1. Действие для системы частиц, взаимодействующих с электромагнитным полем

Действие является аддитивной функцией, поэтому действие для ансамбля частиц, взаимодействующих посредством электромагнитного поля, получается из (8.1) суммированием по отдельным частицам. При этом необходимо учесть, что каждая частица движется в поле, создаваемом всеми остальными частицами системы:

$$\begin{aligned}
 S = & \frac{1}{16\pi} \int F_{\mu\nu}(x) F_{\nu\mu}(x) dV dt - \sum_a \frac{1}{2m_a} \int \left[-\frac{1}{c^2} \left(-i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}_a}{\partial t} - q_a \varphi(\mathbf{r}_a, t) \bar{\Psi}_a \right) \times \right. \\
 & \times \left(i\hbar \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} - q_a \varphi(\mathbf{r}_a, t) \Psi_a \right) + \left(i\hbar \nabla \bar{\Psi}_a - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a, t) \bar{\Psi}_a \right) \times \\
 & \times \left(-i\hbar \nabla \Psi_a - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a, t) \Psi_a \right) + m_a^2 c^2 \bar{\Psi}_a \Psi_a \Big] dV_a dt + \\
 & + \sum_a \mu_a \int \bar{\Psi}_a \left[i\boldsymbol{\alpha}_a \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}_a, t)}{\partial t} + \nabla \varphi(\mathbf{r}_a, t) \right) + \boldsymbol{\Sigma}_a \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}_a, t) \right] \Psi_a dV_a dt,
 \end{aligned} \tag{15.1}$$

где, для того чтобы избежать эффектов самодействия, мы, так же как и в гл. 6, полагаем, что

$$A_\mu(\mathbf{r}_a, t) = \sum_{b(\neq a)} A_{b\mu}(\mathbf{r}_a, t).$$

При этом если ансамбль частиц взаимодействует с внешним полем, то суммирование по b включает и суммирование по источникам внешнего электромагнитного поля.

Варьирование действия (15.1) по $\bar{\Psi}_a$ приводит нас к уравнениям, совпадающим по виду с уравнениями для одной частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле:

$$\left\{ \frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q_a \varphi(\mathbf{r}_a) \right)^2 - \left[\left(\mathbf{p}_a - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \right)^2 + m_a^2 c^2 + 2m_a \mu_a (i\boldsymbol{\alpha}_a \mathbf{E}(\mathbf{r}_a) - \boldsymbol{\Sigma}_a \mathbf{B}(\mathbf{r}_a)) \right] \right\} \Psi_a = 0, \quad (15.2)$$

а варьирование действия по потенциалам поля приводит нас к уравнениям для поля, в которых 4-вектор плотности тока представляет собой сумму плотностей тока отдельных частиц:

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \sum_a \mathbf{j}_a(\mathbf{r}, t), \quad (15.3)$$

$$\Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi \sum_a \rho_a(\mathbf{r}, t). \quad (15.4)$$

При выводе уравнений для поля (15.3)–(15.4) мы воспользовались условием лоренцевой калибровки

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (15.5)$$

Компоненты 4-вектора плотности тока, входящие в (15.3)–(15.4), имеют вид

$$\mathbf{j}_a(\mathbf{r}, t) = \frac{q_a}{m_a} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \bar{\Psi}_a \cdot \Psi_a - \bar{\Psi}_a \nabla \Psi_a) - \frac{q_a}{c} \sum_{b(\neq a)} \bar{\Psi}_a \mathbf{A}_b(\mathbf{r}, t) \Psi_a \right] + c\mu_a \operatorname{rot} (\bar{\Psi}_a \boldsymbol{\Sigma}_a \Psi_a) - i\mu_a \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\Psi}_a \boldsymbol{\alpha}_a \Psi_a), \quad (15.6)$$

$$\rho_a(\mathbf{r}, t) = \frac{q_a}{m_a c} \left[-\frac{i\hbar}{2c} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}_a}{\partial t} \Psi_a - \bar{\Psi}_a \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} \right) - \frac{q_a}{c} \sum_{b(\neq a)} \bar{\Psi}_a \varphi_b(\mathbf{r}, t) \Psi_a \right] + i\mu_a \nabla (\bar{\Psi}_a \boldsymbol{\alpha}_a \Psi_a). \quad (15.7)$$

Таким образом, из (15.3)–(15.7) видно, что, во-первых, потенциалы электромагнитного поля, создаваемого системой частиц, являются суммой потенциалов полей, создаваемых отдельными частицами, и, во-вторых, что каждая частица движется в поле, создаваемом всеми остальными частицами системы.

Как мы уже отмечали в гл. 6, уравнение движения одиночной частицы в заданном внешнем поле получается варьированием действия (15.1) по волновой функции частицы. При этом первое слагаемое в (15.1) зависит от потенциалов внешнего электромагнитного поля и потенциалов поля, создаваемого частицей, которые определяются решением уравнений (15.3)–(15.4). Энергия многочастичной системы складывается из кинетической энергии движения частиц, энергии создаваемого ими поля, энергии взаимодействия частиц с внешним электромагнитным полем, а также энергии взаимодействия частиц друг с другом посредством электромагнитного поля, которая зависит от их взаимного расположения.

Пусть многочастичной системой является одиночный атом, тогда потенциалы поля, входящие в действие (15.1), являются функционалами волновых функций частиц, составляющих атом. Вид указанной функциональной зависимости определяется решением уравнений (15.3)–(15.4). В этом случае первое слагаемое в (15.1) удобно преобразовать к следующему виду:

$$\begin{aligned} S_f &= \frac{1}{16\pi} \int F_{\mu\nu} F_{\nu\mu} dV dt = \\ &= \frac{1}{8\pi} \int \left[A_\mu \frac{\partial^2 A_\mu}{\partial x_\nu^2} + \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(A_\nu \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} \right) \right) \right] dV dt = \\ &= -\frac{1}{2c} \int A_\mu j_\mu dV dt + \frac{1}{8\pi} \int \frac{\partial}{\partial x_\mu} (A_\nu F_{\nu\mu}) dV dt, \end{aligned}$$

при выводе которого мы воспользовались уравнениями (15.3)–(15.4). Поскольку атом является в целом нейтральной системой, то интеграл от 4-дивергенции обращается в нуль и выражение для S_f принимает вид

$$S_f = -\frac{1}{2c} \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \int \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) \mathbf{j}_a(\mathbf{r}_a) dV_a dt + \frac{1}{2} \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \int \varphi_b(\mathbf{r}_a) \rho_a(\mathbf{r}_a) dV_a dt.$$

Подставляя последнее выражение в (15.1), получаем

$$\begin{aligned} S = - \sum_a \frac{1}{2m_a} \int \bar{\Psi}_a \cdot \left[-i\hbar \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{q_a}{c} A_\mu(\mathbf{r}_a, t) \right) \frac{\partial}{\partial x_\mu} + m_a^2 c^2 \right] \Psi_a dV_a dt + \\ + \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \frac{\mu_a}{2} \int \bar{\Psi}_a (\boldsymbol{\Sigma}_a \mathbf{B}_b - i\boldsymbol{\alpha}_a \mathbf{E}_b) \Psi_a dV_a dt. \quad (15.8) \end{aligned}$$

Потенциалы электромагнитного поля, входящие в трансляционную часть действия (15.8), являются функционалами волновых функций частиц. Например, плотность тока $\mathbf{j}_b(\mathbf{r}_b, t)$ частицы b определяет векторный потенциал $\mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a, t)$ в месте расположения частицы a .

В случае водородоподобного атома или иона действие (15.8) принимает вид

$$\begin{aligned}
 S = & -\frac{1}{2m_e} \int \bar{\Psi}_e \cdot \left[\left(p_{e\mu} - \frac{q_e}{c} A_{n\mu} \right) p_{e\mu} + m_e^2 c^2 \right] \Psi_e dV_e dt - \\
 & -\frac{1}{2m_n} \int \bar{\Psi}_n \cdot \left[\left(p_{n\mu} - \frac{q_n}{c} A_{e\mu} \right) p_{n\mu} + m_n^2 c^2 \right] \Psi_n dV_n dt + \\
 & + \frac{\mu_e}{2} \int \bar{\Psi}_e (\boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{B}_n - i\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{E}_n) \Psi_e dV_e dt + \\
 & + \frac{\mu_n}{2} \int \bar{\Psi}_n (\boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{B}_e - i\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{E}_e) \Psi_n dV_n dt. \quad (15.9)
 \end{aligned}$$

Варьируя полученное действие по волновым функциям электрона и ядра, мы получаем систему интегро-дифференциальных уравнений со сдвигом по времени. Например, для волновой функции электрона получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{1}{2m_e} \left[\left(p_{e\mu} - \frac{q_e}{c} A_{n\mu} \right) p_{e\mu} + m_e^2 c^2 \right] + \frac{\mu_e}{2} (\boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{B}_n - i\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{E}_n) \right\} \Psi_e + \\
 & + \int \frac{1}{r_{ne}} \left[\frac{q_n}{2m_n c} \bar{\Psi}_n(\mathbf{r}_n, t') p_{n\mu} \Psi_n(\mathbf{r}_n, t') - \right. \\
 & \left. - \frac{i\mu_n}{2} \frac{\partial}{\partial x_{n\nu}} (\bar{\Psi}_n(\mathbf{r}_n, t') (\gamma_\mu^{(n)} \gamma_\nu^{(n)} - \gamma_\nu^{(n)} \gamma_\mu^{(n)}) \Psi_n(\mathbf{r}_n, t') \right] dV_n \times \\
 & \times \left[\frac{q_e}{m_e} \left(p_{e\mu} - \frac{q_e}{c} A_{n\mu} \right) - i c \mu_e \frac{\partial}{\partial x_{e\nu}} (\gamma_\mu^{(e)} \gamma_\nu^{(e)} - \gamma_\nu^{(e)} \gamma_\mu^{(e)}) \right] \Psi_e,
 \end{aligned}$$

где $t' = t + r_{ne}/c$.

15.2. Уравнения для электромагнитного поля

Итак, действие для атома, т.е. в целом нейтрального ансамбля заряженных частиц, включает потенциалы электромагнитного поля, являющиеся функционалами волновых функций частиц ансамбля. В настоящем разделе мы приведем выражения, позволяющие определить потенциалы и напряженности электромагнитного поля, создаваемого ансамблем частиц.

15.2.1. Стационарные поля. Определим сначала напряженность электрического и магнитного полей, создаваемых частицей, находящейся в стационарном состоянии с волновой функцией $\Psi_a(\mathbf{r}, t) = \Psi_a(\mathbf{r}) \exp(-iE_a t/\hbar)$. Скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля, создаваемые частицей a в месте расположения

частицы b , определяются решением стационарных волновых уравнений (15.3)–(15.4) и имеют вид

$$\varphi_a(\mathbf{r}_b) = \frac{q_a}{m_a c^2} \int \frac{\bar{\Psi}_a (E_a - q_a \varphi_b(\mathbf{r}_a)) \Psi_a}{r_{ba}} dV_a - i\mu_a \int \frac{\bar{\Psi}_a \boldsymbol{\alpha}_a \mathbf{r}_{ba} \Psi_a}{r_{ba}^3} dV_a, \quad (15.10)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_a(\mathbf{r}_b) = & \frac{q_a}{m_a c} \int \frac{1}{r_{ba}} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \bar{\Psi}_a \cdot \Psi_a - \bar{\Psi}_a \nabla \Psi_a) - \right. \\ & \left. - \frac{q_a}{c} \bar{\Psi}_a \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) \Psi_a \right] dV_a + \mu_a \int \frac{\bar{\Psi}_a [\boldsymbol{\Sigma}_a \mathbf{r}_{ba}] \Psi_a}{r_{ba}^3} dV_a, \quad (15.11) \end{aligned}$$

где $\mathbf{r}_{ba} = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a$, а потенциалы $\mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a)$ и $\varphi_b(\mathbf{r}_a)$ описывают поля, с которыми взаимодействуют частицы и которые создаются внешними по отношению к рассматриваемой частице зарядами. Полученные формулы имеют простой физический смысл. Первое слагаемое в (15.10) определяет потенциал поля, создаваемый распределенным зарядом с плотностью

$$\rho_a(\mathbf{r}_a) = \frac{q_a}{m_a c^2} \bar{\Psi}_a (E_a - q_a \varphi_b(\mathbf{r}_a)) \Psi_a.$$

Второе слагаемое в (15.10) определяет потенциал поля, создаваемого распределенным зарядом с вектором электрической поляризации, определяемым выражением

$$\mathbf{P}_a = -i\mu_a \bar{\Psi}_a \boldsymbol{\alpha}_a \Psi_a.$$

Первое слагаемое в (15.11) определяет векторный потенциал поля, обусловленный трансляционным движением частицы. Второе слагаемое в (15.11) определяет векторный потенциал, создаваемый распределенным зарядом с вектором намагниченности

$$\mathbf{M}_a = \mu_a \bar{\Psi}_a \boldsymbol{\Sigma}_a \Psi_a.$$

Используя (15.10)–(15.11), для напряженности электрического и магнитного полей, создаваемых частицей, получаем

$$\mathbf{E}_a(\mathbf{r}_b) = \int \frac{\mathbf{r}_{ba} \rho_a(\mathbf{r}_a)}{r_{ba}^3} dV_a + \int \frac{(3\mathbf{r}_{ba} (\mathbf{P}_a \mathbf{r}_{ba}) - \mathbf{P}_a r_{ba}^2)}{r_{ba}^5} dV_a, \quad (15.12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_a(\mathbf{r}_b) = & \int \frac{(3\mathbf{r}_{ba} (\mathbf{M}_a \mathbf{r}_{ba}) - \mathbf{M}_a r_{ba}^2)}{r_{ba}^5} dV_a - \\ & - \frac{q_a}{m_a c} \int \frac{1}{r_{ba}^3} \left\{ \frac{i\hbar}{2} ([\mathbf{r}_{ba} \nabla_a] \bar{\Psi}_a \cdot \Psi_a - \bar{\Psi}_a \cdot [\mathbf{r}_{ba} \nabla_a] \Psi_a) - \right. \\ & \left. - \frac{q_a}{c} \bar{\Psi}_a [\mathbf{r}_{ba} \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a)] \Psi_a \right\} dV_a. \quad (15.13) \end{aligned}$$

Физический смысл полученных формул весьма прозрачен и не требует дополнительных пояснений.

15.2.2. Симметричная форма уравнений для электромагнитного поля. Формулы (15.10)–(15.11) можно легко обобщить и на нестационарный случай. Однако интерпретация выражений (7.21)–(7.22) для векторов электрической и магнитной поляризации спинорного поля становится более наглядной, если перейти от уравнений для потенциалов (15.3)–(15.4) к уравнениям для напряженности полей, т.е. к системе уравнений Максвелла.

Как мы отмечали в гл. 7, 4-вектор плотности тока спинорного поля имеет две составляющие, одна из них связана с трансляционным движением, а вторая — с движением по внутренним степеням свободы, которую мы условно назвали спиновой частью тока. Трансляционная часть плотности тока пропорциональна заряду частицы q_0 и имеет вид

$$\begin{aligned}\rho_t(\mathbf{r}, t) &= \frac{q_0}{m_0 c} \left[-\frac{i\hbar}{2c} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi - \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi} \varphi \Psi \right], \\ \mathbf{j}_t(\mathbf{r}, t) &= \frac{q_0}{m_0} \left[\frac{i\hbar}{2} (\nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi - \bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi) - \frac{q_0}{c} \bar{\Psi} \mathbf{A} \Psi \right].\end{aligned}$$

Спиновая часть плотности тока пропорциональна магнитному моменту частицы μ_0 и определяется выражением (7.17)

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_s &= c\mu_0 \operatorname{rot} (\bar{\Psi} \boldsymbol{\Sigma} \Psi) - i\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi), \\ \rho_s &= i\mu_0 \nabla (\bar{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \Psi).\end{aligned}$$

Каждая из указанных двух частей 4-вектора плотности тока удовлетворяет уравнению непрерывности. Например,

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_t = 0.$$

Используя, как и ранее, стандартное определение векторов напряженности электрического поля \mathbf{E} и индукции магнитного поля \mathbf{B} ,

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi, \quad \mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (15.14)$$

уравнения (7.3) для потенциала электромагнитного поля можно записать в следующем тождественном виде:

$$\operatorname{rot} (\mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}) = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_t, \quad (15.15)$$

$$\operatorname{div} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = 4\pi \rho_t, \quad (15.16)$$

где векторы $\mathbf{P} = \mathbf{P}_s$ и $\mathbf{M} = \mathbf{M}_s$ в случае одиночной частицы определены равенствами (7.21) и (7.22), а в случае ансамбля частиц являются суммой по ансамблю в соответствии с выражениями (15.6) и (15.7).

Уравнения (15.15)–(15.16), как обычно, можно дополнить следующими двумя уравнениями:

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (15.17)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (15.18)$$

которые непосредственно следуют из определений (15.14).

Выше мы показали, что векторы \mathbf{P} и \mathbf{M} имеют смысл векторов электрической и магнитной поляризации, поэтому введем чисто формально векторы индукции электрического поля и напряженности магнитного поля, определив их выражениями

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}, \quad (15.19)$$

тогда система уравнений (15.15)–(15.18) примет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D} &= 4\pi\rho_e, \\ \operatorname{div} \mathbf{H} &= 4\pi\rho_m, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_e, \\ \operatorname{rot} \mathbf{D} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_m, \end{aligned} \quad (15.20)$$

где $\rho_e(\mathbf{r}, t) = \rho_t(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}_t(\mathbf{r}, t)$ и

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t) &= -\mu_0 \operatorname{div} (\bar{\Psi} \Sigma \Psi), \\ \mathbf{j}_m(\mathbf{r}, t) &= \mu_0 \left[\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\Psi} \Sigma \Psi) + ic \operatorname{rot} (\bar{\Psi} \alpha \Psi) \right]. \end{aligned} \quad (15.21)$$

Таким образом, мы видим, что использование определений (15.19), аналогичных классическим, приводит систему уравнений Максвелла к симметричному виду, где ρ_e и \mathbf{j}_e играют роль плотности электрического заряда и тока, а величины ρ_m и \mathbf{j}_m — плотности магнитного заряда и тока. Следует отметить, что плотности магнитного заряда и тока, так же как и плотности электрического заряда и тока, удовлетворяют уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0. \quad (15.22)$$

Для плотности наведенного электрического заряда и тока в классической электродинамике полагается

$$\rho_e(\mathbf{r}, t) = -\operatorname{div} \mathbf{P}_e \quad \text{и} \quad \mathbf{j}_e(\mathbf{r}, t) = \partial \mathbf{P}_e / \partial t + c \operatorname{rot} \mathbf{M}_e, \quad (15.23)$$

где векторы \mathbf{P}_e и \mathbf{M}_e описывают внутренние поля в среде, возникновение которых обусловлено тем, что внешнее поле нарушает центральную симметрию изначально неупорядоченной среды. Следует отметить, что аналогичные соотношения между компонентами

4-вектора $j_\mu^{(t)} = (\mathbf{j}_e, ic\rho_e)$ и векторами $\mathbf{P}^{(t)} = \mathbf{P}_e$ и $\mathbf{M}^{(t)} = \mathbf{M}_e$ следуют из выражения (13.27), полученного в рамках одночастичной задачи в приближении теории возмущений. Действительно, в пренебрежении эффектами пространственной дисперсии выражение (13.27) принимает вид

$$\mathbf{j}^{(t)} = \frac{\partial \mathbf{P}^{(t)}}{\partial t} + c \operatorname{rot} \mathbf{M}^{(t)}.$$

В свою очередь, используя уравнение непрерывности, из (13.27) получаем

$$\rho_t = \rho_0 - \operatorname{div} \mathbf{P}^{(t)},$$

где ρ_0 — константа, возникающая при интегрировании уравнения непрерывности по времени.

Несложно видеть аналогию между уравнениями (15.23) и (15.21). Действительно, поскольку векторы \mathbf{P} и \mathbf{M} являются векторами локальной электрической и магнитной поляризации спинорного поля, то из соображений симметрии получаем

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = -\operatorname{div} \mathbf{M} \quad \text{и} \quad \mathbf{j}_m(\mathbf{r}, t) = \partial \mathbf{M} / \partial t - c \operatorname{rot} \mathbf{P}.$$

Таким образом, несмотря на тождественность систем уравнений (15.15)–(15.18) и (15.20), аналогия с задачами классической электродинамики дает дополнительные представления о структуре самосогласованных (или стационарных) состояний многочастичных систем. Следуя аналогии с представлениями классической электродинамики, из уравнений (15.20) мы видим, что электромагнитное поле наводит электрическую и магнитную поляризацию спинорного материального поля в каждой локальной точке пространства области их совместного существования.

Действительно, в гл. 8 мы показали, что вектор магнитной поляризации спинорного поля, взаимодействующего с внешним магнитным полем, в каждой точке пространства параллелен направлению магнитного поля в данной точке пространства, а вектор электрической поляризации параллелен направлению электрического поля. В случае произвольной многочастичной системы плотность тока \mathbf{j}_e и плотность заряда ρ_e , входящие в правые части уравнений (15.15) и (15.16), могут включать плотность тока и заряда скалярных частиц или макроскопических тел, т. е. 4-вектор плотности тока можно представить в виде: $j_{t\mu} = j_{t\mu}^{(1/2)} + j_{t\mu}^{(0)}$. Если суммарный заряд скалярных частиц или макроскопических тел превышает заряд спинорных частиц, то $|j_{t\mu}^{(0)}| \gg |j_{t\mu}^{(1/2)}|$, следовательно, мы можем считать, что $j_{t\mu}$ в правой части уравнений (15.15)–(15.16) обусловлено макроскопическими зарядами и токами. Вместе с тем векторы \mathbf{M} и \mathbf{P} , фигурирующие в уравнениях (15.15)–(15.16), описывают магнитную и электрическую поляризацию спинорных полей. Как мы уже говорили, уравнения (15.17) и (15.18) являются прямым следствием определений (15.14). Однако два последних уравнения системы уравнений (15.20), которые следу-

ют из них, отражают симметрию, обусловленную симметрией тензора электромагнитного поля в среде.

15.3. Водородоподобный атом

Настоящий раздел посвящен формулировке общей задачи расчета спектра стационарных состояний двухчастичной задачи и обсуждению различных приближенных методов решения указанной задачи.

15.3.1. Общая задача. Итак, если мы берем за основу действие (15.1), то стационарные состояния атома определяются из решения следующей краевой задачи:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_{e,n}} \left[\left(\mathbf{p}_{e,n} - \frac{q_{e,n}}{c} \mathbf{A}_{n,e}(\mathbf{r}_{e,n}) \right)^2 + m_{e,n}^2 c^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{c^2} (E_{e,n} - q_{e,n} \varphi_{n,e}(\mathbf{r}_{e,n}))^2 \right] \Psi_{e,n} + \\ + \mu_{e,n} (i \boldsymbol{\alpha}_{e,n} \mathbf{E}_{n,e}(\mathbf{r}_{e,n}) - \boldsymbol{\Sigma}_{e,n} \mathbf{B}_{n,e}(\mathbf{r}_a)) \Psi_{e,n} = 0, \\ \Delta_{e,n} \mathbf{A}_{e,n} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{e,n}, \quad \Delta_{e,n} \varphi_{e,n} = -4\pi \rho_{e,n}. \end{aligned} \quad (15.24)$$

Указанная краевая задача включает уравнения для волновых функций электрона и ядра атома и четыре уравнения для компонент потенциала электромагнитного поля. Граничные условия для связанных состояний атома определяются обращением в нуль амплитуд всех полей на бесконечности ($r \rightarrow 0$) и конечностью нормы волновой функции каждой из частиц, которые определяют допустимый вид их асимптотического поведения при $r_{e,n} \rightarrow 0$.

Таким образом, мы видим, что расчет спектра собственных состояний многочастичной системы представляет собой непростую математическую задачу даже в случае водородоподобного атома. Однако если нас интересуют релятивистские поправки к стандартному спектру состояний атома, то можно воспользоваться приближенными методами, обсуждению которых посвящен настоящий раздел.

15.3.2. Энергия ансамбля частиц. Используя (15.1), несложно получить выражения для обобщенных импульсов, сопряженных обобщенным координатам полей \mathbf{A} , $\bar{\Psi}$ и Ψ :

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{A}}} = \frac{1}{4\pi c} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right) + i \sum_a \frac{\mu_a}{c} \bar{\Psi}_a \boldsymbol{\alpha}_a \Psi_a, \\ \bar{\Pi}_a &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{\Psi}}_a} = \frac{\hbar}{2m_a c} \left(\frac{\hbar}{c} \frac{\partial \bar{\Psi}_a}{\partial t} - i \frac{q_a}{c} \varphi \bar{\Psi}_a \right), \\ \Pi_a &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\Psi}_a} = \frac{\hbar}{2m_a c} \left(\frac{\hbar}{c} \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} + i \frac{q_a}{c} \varphi \Psi_a \right). \end{aligned} \quad (15.25)$$

Используя эти выражения, получаем следующее выражение для функции Гамильтона:

$$\begin{aligned}
 H &= \mathbf{\Pi} \dot{\mathbf{A}} + \sum_a \left(\bar{\Pi}_a \dot{\Psi}_a + \dot{\bar{\Psi}}_a \Pi_a \right) - L = \\
 &= \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi)^2 + (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] + \\
 &+ \sum_a \frac{1}{2m_a} \left[\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial \bar{\Psi}_a}{\partial t} \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} - \frac{q_a^2}{c^2} \varphi^2(\mathbf{r}_a) \bar{\Psi}_a \Psi_a + \right. \\
 &+ \left. \left(i\hbar \nabla \bar{\Psi}_a - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \bar{\Psi}_a \right) \left(-i\hbar \nabla \Psi_a - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \Psi_a \right) + m_a^2 c^2 \bar{\Psi}_a \Psi_a \right] - \\
 &- \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \mu_a \left(i\bar{\Psi}_a \boldsymbol{\alpha}_a \nabla \varphi_b(\mathbf{r}_a) \Psi_a + \bar{\Psi}_a \boldsymbol{\Sigma}_a \mathbf{B}_b(\mathbf{r}_a) \Psi_a \right), \quad (15.26)
 \end{aligned}$$

где, так же как и ранее,

$$A_\mu(\mathbf{r}_a, t) = \sum_{b(\neq a)} A_{b\mu}(\mathbf{r}_a, t).$$

Таким образом, энергия системы частиц, взаимодействующих посредством электромагнитного поля, определяется выражением

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) dV + \\
 &+ \sum_a \frac{1}{2m_a c^2} \int \left(-i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}_a}{\partial t} - q_a \varphi(\mathbf{r}_a) \bar{\Psi}_a \right) \left(i\hbar \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} - q_a \varphi(\mathbf{r}_a) \Psi_a \right) dV_a + \\
 &+ \sum_a \frac{1}{2m_a} \int \bar{\Psi}_a \left[\left(-i\hbar \nabla - \frac{q_a}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \right)^2 + m_a^2 c^2 \right] \Psi_a dV_a - \\
 &- \sum_{\substack{a, b \\ (a \neq b)}} \mu_a \int \bar{\Psi}_a \boldsymbol{\Sigma}_a \mathbf{B}_b(\mathbf{r}_a) \Psi_a dV_a. \quad (15.27)
 \end{aligned}$$

При выводе (15.27) мы воспользовались векторными равенствами

$$(\nabla \varphi)^2 = -\varphi \Delta \varphi + \text{div}(\varphi \nabla \varphi), \quad (15.28)$$

$$\frac{1}{c} \text{div} \left(\varphi \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \nabla \varphi + \frac{1}{c} \varphi \frac{\partial}{\partial t} \text{div } \mathbf{A} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \nabla \varphi - \frac{1}{c^2} \varphi \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}. \quad (15.29)$$

Можно напомнить, что эти равенства мы использовали и во всех предыдущих главах книги, когда получали выражения для энергии многочастичной системы, в которой взаимодействие осуществляется посредством электромагнитного поля.

Преобразования выражения для энергии (15.27) к другим эквивалентным формам мы обсуждали в разделе 7.4.3. Однако в последующем изложении мы можем опираться на выражение (15.27), поэтому остановимся на нем.

15.3.3. Стационарный случай. Рассмотрим для простоты систему, состоящую из двух частиц. Например, атом водорода. В стационарном состоянии волновые функции частиц системы имеют вид

$$\Psi_a(\mathbf{r}, t) = \Psi_a(\mathbf{r}) \exp(-iE_a t/\hbar).$$

В задаче об атоме водорода нас интересуют экстремумы функционала энергии (15.27), которые позволяют определить стационарные состояния, т. е. собственные значения энергии и волновые функции двухчастичной задачи. Энергия системы частиц складывается из кинетической энергии их движения, энергии создаваемого ими поля и энергии взаимодействия посредством электромагнитного поля. Общий алгоритм решения задачи совпадает с описанным выше и состоит в том, что, используя решения уравнений для поля (15.10)–(15.13), мы исключаем из выражения (15.27) полевые переменные, сводя его к виду, зависящему лишь от операторов частиц. Используя формулы (15.28) и формулу

$$\operatorname{rot} \mathbf{A} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{A} = \operatorname{div} [\mathbf{A} \operatorname{rot} \mathbf{A}] + \mathbf{A} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A},$$

для энергии поля в стационарном случае получаем

$$\begin{aligned} E_f &= \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) dV = \frac{1}{8\pi} \int \left((\nabla\varphi)^2 + (\operatorname{rot} \mathbf{A})^2 \right) dV = \\ &= \frac{1}{2} \int \left[\varphi_n(\mathbf{r}_e) \rho_e(\mathbf{r}_e) + \frac{1}{c} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}_e) \mathbf{j}_e(\mathbf{r}_e) \right] dV_e + \\ &\quad + \frac{1}{2} \int \left[\varphi_e(\mathbf{r}_n) \rho_n(\mathbf{r}_n) + \frac{1}{c} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_n) \mathbf{j}_n(\mathbf{r}_n) \right] dV_n, \end{aligned} \quad (15.30)$$

где $\varphi_b(\mathbf{r}_a)$ и $\mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a)$ — потенциалы полей, создаваемых частицей $b = (n, e)$ в месте расположения частицы $a = (e, n)$. Подстановка в (15.30) выражений (15.6)–(15.7) позволяет нам получить выражение для энергии взаимодействия как функционала от волновых функций частиц:

$$\begin{aligned} E_f &= \frac{q_e}{2m_e c^2} \int \bar{\Psi}_e (E_e - q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e)) \varphi_n(\mathbf{r}_e) \Psi_e dV_e + \\ &\quad + \frac{q_n}{2m_n c^2} \int \bar{\Psi}_n (E_n - q_n \varphi_e(\mathbf{r}_n)) \varphi_e(\mathbf{r}_n) \Psi_n dV_n - \\ &\quad - \frac{i\mu_e}{2} \int \bar{\Psi}_e \boldsymbol{\alpha}_e \nabla_e \varphi_n(\mathbf{r}_e) \Psi_e dV_e - \frac{i\mu_n}{2} \int \bar{\Psi}_n \boldsymbol{\alpha}_n \nabla_n \varphi_e(\mathbf{r}_n) \Psi_n dV_n - \\ &\quad - \frac{q_e}{2m_e c} \int \bar{\Psi}_e \mathbf{A}_n \mathbf{p}_e \Psi_e dV_e + \frac{q_n}{2m_n c} \int \bar{\Psi}_n \mathbf{A}_e \mathbf{p}_n \Psi_n dV_n - \\ &\quad - \frac{q_e^2}{2m_e c^2} \int \bar{\Psi}_e \mathbf{A}_n^2 \Psi_e dV_e - \frac{q_n^2}{2m_n c^2} \int \bar{\Psi}_n \mathbf{A}_e^2 \Psi_n dV_n + \\ &\quad + \frac{\mu_e}{2} \int \bar{\Psi}_e \boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{B}_n(\mathbf{r}_e) \Psi_e dV_e + \frac{\mu_n}{2} \int \bar{\Psi}_n \boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{B}_e(\mathbf{r}_n) \Psi_n dV_n. \end{aligned} \quad (15.31)$$

Таким образом, полная энергия атома, складывающаяся из кинетической энергии движения частиц и энергии их взаимодействия, принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}
 E = & \frac{E_e}{2m_e c^2} \int \bar{\Psi}_e (E_e - q_e \varphi_n) \Psi_e dV_e + \frac{E_n}{2m_n c^2} \int \bar{\Psi}_n (E_n - q_n \varphi_e) \Psi_n dV_n + \\
 & + \frac{1}{2m_e} \int \bar{\Psi}_e (\mathbf{p}_e^2 + m_e^2 c^2) \Psi_e dV_e + \frac{1}{2m_n} \int \bar{\Psi}_n (\mathbf{p}_n^2 + m_n^2 c^2) \Psi_n dV_n - \\
 & - \frac{q_e}{2m_e c} \int \bar{\Psi}_e \mathbf{A}_n \mathbf{p}_e \Psi_e dV_e - \frac{q_n}{2m_n c} \int \bar{\Psi}_n \mathbf{A}_e \mathbf{p}_n \Psi_n dV_n - \\
 & - \frac{i\mu_e}{2} \int \bar{\Psi}_e \boldsymbol{\alpha}_e \nabla_e \varphi_n \Psi_e dV_e - \frac{i\mu_n}{2} \int \bar{\Psi}_n \boldsymbol{\alpha}_n \nabla_n \varphi_e \Psi_n dV_n - \\
 & - \frac{\mu_e}{2} \int \bar{\Psi}_e \boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{B}_n \Psi_e dV_e - \frac{\mu_n}{2} \int \bar{\Psi}_n \boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{B}_e \Psi_n dV_n. \quad (15.32)
 \end{aligned}$$

С учетом сказанного в гл. 6 можно положить, что энергия атома является суммой полных энергий электрона и ядра:

$$E = E_e + E_n,$$

поэтому (15.32) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 & \int \bar{\Psi}_e \left\{ \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p}_e^2 + \frac{m_e^2 c^4 - E_e^2}{c^2} \right) + \frac{E_e}{2m_e c^2} q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e) - \right. \\
 & \left. - \frac{q_e}{2m_e c} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}_e) \mathbf{p}_e - \frac{i\mu_e}{2} \boldsymbol{\alpha}_e \nabla_e \varphi_n(\mathbf{r}_e) - \frac{\mu_e}{2} \boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{B}_n(\mathbf{r}_e) \right\} \Psi_e dV_e + \\
 & + \int \bar{\Psi}_n \left\{ \frac{1}{2m_n} \left(\mathbf{p}_n^2 + \frac{m_n^2 c^4 - E_n^2}{c^2} \right) + \frac{E_n}{2m_n c^2} q_n \varphi_e(\mathbf{r}_n) - \right. \\
 & \left. - \frac{q_n}{2m_n c} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_n) \mathbf{p}_n - \frac{i\mu_n}{2} \boldsymbol{\alpha}_n \nabla_n \varphi_e(\mathbf{r}_n) - \right. \\
 & \left. - \frac{\mu_n}{2} \boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{B}_e(\mathbf{r}_n) \right\} \Psi_n dV_n = 0. \quad (15.33)
 \end{aligned}$$

Варьирование выражения (15.33) по функциям $\bar{\Psi}_e$ и $\bar{\Psi}_n$ приведет нас к системе уравнений, позволяющей определить собственные значения $E_{e,n}^{(i)}$ и собственные функции $\Psi_{e,n}^{(i)}$ стационарных состояний атома. В частности, в пределе свободных частиц, т. е. $|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_n| \rightarrow \infty$, для энергии получаем: $E_a = \sqrt{\hbar^2 k_a^2 c^2 + m_a^2 c^4}$. Однако при проведении варьирования в общем случае необходимо помнить, что потенциалы полей, входящие в (15.33), являются функционалами от волновых функций, вид которых определяется выражениями (15.10) и (15.11). В гл. 6 мы видели, что более простой путь состоит в исключении потенциалов полей из функционала (15.33) и варьировании по про-

изведению волновых функций электрона и ядра. Подставляя (15.10) и (15.11) в (15.33), получаем

$$\int \bar{\Psi}_e \bar{\Psi}_n \left\{ -\frac{E_n \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_e - \frac{E_e \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_n + \frac{m_e^2 c^4 - E_e^2}{2m_e c^2} \frac{E_n}{m_n c^2} + \right. \\ \left. + \frac{m_n^2 c^4 - E_n^2}{2m_n c^2} \frac{E_e}{m_e c^2} + \frac{E_e E_n}{m_e m_n c^4} \frac{q_e q_n}{r} - \frac{q_e^2 q_n^2}{2m_e m_n c^4} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) \frac{1}{r^2} + \right. \\ \left. + i\mu_e q_n \frac{E_n}{m_n c^2} \frac{\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{r}_{en}}{r^3} - i\mu_n q_e \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{r}_{en}}{r^3} - \right. \\ \left. - \frac{q_e q_n}{2c^2} \frac{1}{r} \left(\mathbf{v}_n \frac{\mathbf{p}_e}{m_e} + \mathbf{v}_e \frac{\mathbf{p}_n}{m_n} \right) - \frac{q_e \mu_n \hbar}{m_e c} \frac{\boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{l}_e}{r^3} - \frac{q_n \mu_e \hbar}{m_n c} \frac{\boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{l}_n}{r^3} + \right. \\ \left. + \mu_e \mu_n \frac{3(\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{r}_{en})(\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{r}_{en}) - \boldsymbol{\alpha}_e \boldsymbol{\alpha}_n r^2}{r^5} - \right. \\ \left. - \mu_e \mu_n \frac{3(\boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{r}_{en})(\boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{r}_{en}) - \boldsymbol{\Sigma}_e \boldsymbol{\Sigma}_n r^2}{r^5} + H_h \right\} \Psi_e \Psi_n = 0, \quad (15.34)$$

где $r = |\mathbf{r}_{en}|$. Так же как и в разделе 6.3.2, мы ввели обозначение

$$\mathbf{v}_b = \frac{1}{m_b} \left(\mathbf{p}_b - \frac{q_b}{c} \mathbf{A}_a(\mathbf{r}_b) - \frac{i\hbar |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}{2} \nabla_b \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} \right), \quad (15.35)$$

которое появляется в результате преобразования выражения $\nabla \bar{\Psi} \cdot \Psi - \bar{\Psi} \cdot \nabla \Psi$ к виду $\bar{\Psi} \nabla \Psi$.

Варьирование выражения (15.34) по функции $\bar{\Psi}_e \bar{\Psi}_n$ приводит нас к уравнению для функции $\Psi_e \Psi_n$, оператор этого уравнения совпадает с выражением в фигурных скобках (15.34). Обсудим физический смысл отдельных слагаемых получившегося уравнения.

1) Хорошо известно, что энергия связи состояний стандартного базиса в атоме водорода много меньше энергии покоя электрона и протона. В свою очередь $m_e c^2 \ll m_n c^2$. Следовательно, $E_e \ll E_n$ и $E_n \approx m_n c^2$. Учитывая эти соотношения, первые шесть слагаемых в (15.34) в пределе бесконечно тяжелого ядра можно привести к виду

$$H_C = -\frac{E_n \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_e - \frac{E_e \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \Delta_n + \frac{m_e^2 c^4 - E_e^2}{2m_e c^2} \frac{E_n}{m_n c^2} + \frac{m_n^2 c^4 - E_n^2}{2m_n c^2} \frac{E_e}{m_e c^2} + \\ + \frac{E_e E_n}{m_e m_n c^4} \frac{q_e q_n}{r} - \frac{q_e^2 q_n^2}{2m_e m_n c^4} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) \frac{1}{r^2} \approx \\ \approx -\frac{\hbar^2}{2m_e c^2} \Delta_e + \frac{m_e^2 c^4 - E_e^2}{2m_e c^2} + \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{q_e q_n}{r} - \frac{1}{2m_e c^2} \frac{q_e^2 q_n^2}{r^2} = \\ = \frac{1}{2m_e c^2} \left[p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4 - (E_e - q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e))^2 \right]. \quad (15.36)$$

Таким образом, несложно видеть, что первые шесть слагаемых описывают кинетическую энергию электрона и ядра атома и потенциальную энергию их кулоновского взаимодействия. В пределе бесконечно тяже-

лого ядра эти слагаемые совпадают с независимыми от спина слагаемыми уравнения для одиночного электрона, движущегося во внешнем кулоновском поле.

2) Два следующих слагаемых в этом выражении,

$$H_{PE} = i\mu_e q_n \frac{E_n}{m_n c^2} \frac{\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{r}_{en}}{r^3} - i\mu_n q_e \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{r}_{en}}{r^3}, \quad (15.37)$$

описывают взаимодействие вектора электрической поляризации частицы с электрическим полем, создаваемым другой частицей.

3) Девятое слагаемое,

$$-\frac{q_e q_n}{2c^2} \frac{1}{r} \left(\mathbf{v}_n \frac{\mathbf{p}_e}{m_e} + \mathbf{v}_e \frac{\mathbf{p}_n}{m_n} \right),$$

уже встречалось нам в гл. 6. Используя преобразования

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_n \mathbf{p}_e &= \frac{1}{r_{en}^2} \left\{ [\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_n] [\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_e] + (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_n) (\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_e) + \frac{i\hbar}{m_n} (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_e) + \frac{\hbar^2}{2m_n} \right\}, \\ \mathbf{v}_e \mathbf{p}_n &= \frac{1}{r_{en}^2} \left\{ [\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_e] [\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_n] + (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_e) (\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_n) - \frac{i\hbar}{m_e} (\mathbf{r}_{en} \mathbf{v}_n) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \right\} \end{aligned}$$

и условие калибровки поля

$$\operatorname{div}_a \mathbf{A}_b(\mathbf{r}_a) = -\frac{q_b}{c} \int \frac{\bar{\Psi}_b \mathbf{r}_{ab} \mathbf{v}_b \Psi_b}{r_{ab}^3} dV_b = 0,$$

это слагаемое преобразуется к следующему виду:

$$H_{ll} = \frac{q_e q_n \hbar^2}{2m_e m_n c^2} \frac{\mathbf{l}_e \mathbf{l}_n + \mathbf{l}_n \mathbf{l}_e - 1}{r^3}, \quad (15.38)$$

где

$$\hbar \mathbf{l}_e = [\mathbf{r}_{en} \mathbf{p}_e], \quad \hbar \mathbf{l}_n = [\mathbf{r}_{ne} \mathbf{p}_n]. \quad (15.39)$$

Так же как и в (6.69), последнее слагаемое в (15.38) связано с некоммутативностью операторов \mathbf{l}_e и \mathbf{l}_n . Это слагаемое описывает взаимодействие орбитальных угловых моментов частиц.

4) Два следующих слагаемых:

$$H_{ls} = -\frac{q_e \mu_n \hbar}{m_e c} \frac{\boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{l}_e}{r^3} - \frac{q_n \mu_e \hbar}{m_n c} \frac{\boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{l}_n}{r^3}, \quad (15.40)$$

описывают спин-орбитальное взаимодействие частиц.

5) Слагаемые

$$H_{PP} = \mu_e \mu_n \frac{3(\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{r}_{en})(\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{r}_{en}) - \boldsymbol{\alpha}_e \boldsymbol{\alpha}_n r^2}{r^5} \quad (15.41)$$

и

$$H_{MM} = -\mu_e \mu_n \frac{3(\boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{r}_{en})(\boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{r}_{en}) - \boldsymbol{\Sigma}_e \boldsymbol{\Sigma}_n r^2}{r^5} \quad (15.42)$$

описывают взаимодействие электрических и магнитных моментов частиц.

Несложно видеть, что взаимодействия, входящие в операторы H_{Coul} и H_{PE} , зависят от расстояния между частицами как $1/r$ и $1/r^2$. Остальные взаимодействия зависят от расстояния как $1/r^3$. В гл. 6 мы показали, что поправки, вносимые слагаемыми, пропорциональными $1/r^3$, к кулоновскому спектру имеют величину порядка $Ry \times \alpha^2 m_e/m_n$. В проведенном анализе мы не учитывали слагаемых, вносящих поправки более высокого порядка. В уравнении (15.34) эти поправки обозначены символом H_h . Они имеют вид

$$\begin{aligned}
 H_h = & -\frac{q_n \varphi_e(\mathbf{r}_n)}{2m_e m_n c^4} (p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4 - E_e^2) - \frac{q_e \varphi_n(\mathbf{r}_e)}{2m_e m_n c^4} (p_n^2 c^2 + m_n^2 c^4 - E_n^2) - \\
 & -\frac{E_e q_n^2}{2m_e m_n c^4} \frac{q_e}{r} \left(\varphi_e - \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{q_e}{r} \right) - \frac{E_n q_e^2}{2m_e m_n c^4} \frac{q_n}{r} \left(\varphi_n - \frac{E_n}{m_n c^2} \frac{q_n}{r} \right) + \\
 & + i\mu_e \frac{\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{r}_{ne}}{r^3} \frac{q_n^2 \varphi_e(\mathbf{r}_n)}{2m_n c^2} + i\mu_n \frac{\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{r}_{en}}{r^3} \frac{q_e^2 \varphi_n(\mathbf{r}_e)}{2m_e c^2} - \mu_e \frac{q_n^2}{2m_n c} \frac{\mathbf{A}_e[\mathbf{r}_{ne} \boldsymbol{\Sigma}_e]}{r^3} - \\
 & - \mu_n \frac{q_e^2}{2m_e c} \frac{\mathbf{A}_n[\mathbf{r}_{en} \boldsymbol{\Sigma}_n]}{r^3}. \quad (15.43)
 \end{aligned}$$

15.3.4. Интегралы движения для водородоподобного атома.

Итак, варьирование уравнения (15.34) по $\bar{\Psi}_e(\mathbf{r}_e) \bar{\Psi}_n(\mathbf{r}_n)$ приводит к следующему уравнению движения:

$$(H_C + H_{PE} + H_U + H_{ls} + H_{PP} + H_{MM}) \Psi_e(\mathbf{r}_e) \Psi_n(\mathbf{r}_n) = 0, \quad (15.44)$$

где мы опустили поправки более высокого порядка, определяемые выражением (15.43).

Введем радиус-вектор взаимного расположения частиц \mathbf{r} и радиус-вектор центра масс \mathbf{R} :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_n, \quad \mathbf{R} = \frac{E_e \mathbf{r}_e + E_n \mathbf{r}_n}{E_e + E_n}. \quad (15.45)$$

Оператор полного орбитального момента движения частиц имеет в этом случае вид

$$\hbar \mathbf{L} = [\mathbf{r}_e \mathbf{p}_e] + [\mathbf{r}_n \mathbf{p}_n] = [\mathbf{r} \mathbf{p}] + [\mathbf{R} \mathbf{P}],$$

где

$$\mathbf{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad \mathbf{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}.$$

Оператор полного углового момента атома

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

является суммой полного орбитального момента движения частиц \mathbf{L} и суммарного спина

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\Sigma}_e + \boldsymbol{\Sigma}_n).$$

Используя выражения (15.45), несложно получить

$$\frac{E_n}{m_n c^2} \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{E_e}{m_e c^2} \frac{p_n^2}{2m_n} = -\frac{\hbar^2 E}{2m_e m_n c^2} \left(\Delta_r + \frac{E_e E_n}{E^2} \Delta_R \right).$$

Ранее мы показали, что оператор полного углового момента коммутирует со слагаемыми $H_C + H_U + H_{I_s} + H_{MM}$ уравнения (15.44). Несложно видеть, что два новых слагаемых, появившиеся в (15.44), также коммутируют с оператором \mathbf{J} . В гл. 12 мы показали, что оператор $[\mathbf{r}\mathbf{p}] + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma}_a$ коммутирует с $\boldsymbol{\alpha}_a \mathbf{E}(\mathbf{r})$, поэтому

$$[\mathbf{J}, H_{PE}] = 0.$$

Учитывая коммутационные свойства операторов $\boldsymbol{\Sigma}$ и $\boldsymbol{\alpha}$:

$$[\Sigma_i, \alpha_j] = 2ie_{ijk} \alpha_k,$$

получаем

$$[(\boldsymbol{\Sigma}_e + \boldsymbol{\Sigma}_n)_i, \boldsymbol{\alpha}_e \boldsymbol{\alpha}_n] = 2ie_{ijk} (\boldsymbol{\alpha}_e)_k (\boldsymbol{\alpha}_n)_j + 2ie_{ijk} (\boldsymbol{\alpha}_e)_j (\boldsymbol{\alpha}_n)_k = 0.$$

Таким образом, операторы полного орбитального момента \mathbf{L} и полного спина \mathbf{S} не коммутируют по отдельности с оператором уравнения (15.44). Коммутирующей величиной является оператор полного углового момента \mathbf{J} :

$$[\mathbf{J}, (H_0 + H_{PE} + H_U + H_{I_s} + H_{PP} + H_{MM})] = 0. \quad (15.46)$$

Оператор уравнения (15.44) зависит лишь от радиуса-вектора $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_n$, поэтому оператор суммарного импульса атома $\mathbf{P} = \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_n$ коммутирует с ним:

$$[\mathbf{P}, (H_0 + H_{PE} + H_U + H_{I_s} + H_{PP} + H_{MM})] = 0. \quad (15.47)$$

Следовательно, стационарные состояния атома можно различать по величине полного импульса \mathbf{P} , величине углового момента j и его проекции m .

15.3.5. Угловые зависимости волновых функций водородоподобного атома. Рассмотрим случай неподвижного атома, когда $\mathbf{P} = 0$. В этом случае уравнение (15.44) принимает вид

$$(H_C + H_{PE} + H_{HF} + H_{PP}) \Psi_e \Psi_n = 0, \quad (15.48)$$

где

$$\begin{aligned}
 H_C &= -\frac{\hbar^2 E}{2m_e m_n c^2} \Delta - \frac{E_e E_n}{m_e m_n c^4} \frac{Z e^2}{r} - \frac{1}{2m_e m_n c^4} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) \frac{Z^2 e^4}{r^2} + \\
 &\quad + \frac{m_e^2 c^4 E_n + m_n^2 c^4 E_e - E_e E_n E}{2m_e m_n c^4}, \\
 H_{PE} &= -i \frac{Z e^2 \hbar}{2m_e m_n c^2} \left(E_n \gamma_e \frac{\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{r}}{r^3} - E_e \gamma_n \frac{\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{r}}{r^3} \right), \\
 H_{HF} &= -\frac{4\mu_B \mu_N}{r^3} \mathbf{l}^2 + \frac{2\mu_B \mu_N}{r^3} (\gamma_e \boldsymbol{\Sigma}_e + \gamma_n \boldsymbol{\Sigma}_n) \mathbf{l} + \\
 &\quad + \frac{\mu_B \mu_N \gamma_e \gamma_n}{r^3} (3(\boldsymbol{\Sigma}_e \mathbf{e})(\boldsymbol{\Sigma}_n \mathbf{e}) - \boldsymbol{\Sigma}_e \boldsymbol{\Sigma}_n), \\
 H_{PP} &= -\frac{\mu_B \mu_N \gamma_e \gamma_n}{r^3} (3(\boldsymbol{\alpha}_e \mathbf{e})(\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{e}) - \boldsymbol{\alpha}_e \boldsymbol{\alpha}_n),
 \end{aligned}$$

где мы воспользовались обозначениями

$$\mu_e = -\gamma_e \mu_B, \quad \mu_n = \gamma_n \mu_N.$$

Здесь $\gamma_{e(n)}$ — гиромагнитный множитель электрона (ядра), а магнетон Бора μ_B и ядерный магнетон μ_N определяются хорошо известными выражениями

$$\mu_B = -\frac{q_e \hbar}{2m_e c} = \frac{|e| \hbar}{2m_e c}, \quad \mu_N = \frac{q_n \hbar}{2m_n c} = \frac{Z|e| \hbar}{2m_n c}.$$

Оператор H_C есть оператор кинетической энергии движения частиц и их взаимодействия посредством кулоновского поля. Оператор H_{PE} описывает взаимодействие вектора электрической поляризации частицы с кулоновским полем, создаваемым частицей противоположного знака. Оператор H_{HF} описывает сверхтонкие взаимодействия, присущие нерелятивистской частице с полуцелым спином. Оператор H_{PP} описывает взаимодействие электрических моментов частиц. Как мы отмечали выше, первые два слагаемых в (15.48) содержат потенциалы, зависящие от расстояния между частицами как $1/r$ и $1/r^2$, вторые два слагаемых пропорциональны $1/r^3$. Оператор H_C не зависит от спиновых операторов, а оператор H_{HF} зависит лишь от диагональных спиновых операторов $\boldsymbol{\Sigma}_a = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_a & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}_a \end{pmatrix}$. Операторы H_{PE} и H_{PP} зависят от антидиагональных операторов $\boldsymbol{\alpha}_a = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}_a \\ \boldsymbol{\sigma}_a & 0 \end{pmatrix}$. Этим обусловлено удобство выделения четырех слагаемых в уравнении (15.48).

Волновая функция уравнения (15.48) представляет собой прямое произведение биспинорных волновых функций:

$$\Psi = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} = \Psi_e \Psi_n = \begin{pmatrix} u_e u_n \\ d_e u_n \\ u_e d_n \\ d_e d_n \end{pmatrix}. \quad (15.49)$$

Исходя из вида уравнения (15.48) удобно ввести оператор L :

$$H = -\frac{\hbar^2 E}{2m_e m_n c^2} L.$$

Подставляя (15.49) в (15.48), получаем

$$\begin{aligned} L_C w_1 + L_{PE}^{(e)} w_2 + L_{PE}^{(n)} w_3 &= -L_{HF} w_1 - L_{PP} w_4, \\ L_C w_2 + L_{PE}^{(e)} w_1 + L_{PE}^{(n)} w_4 &= -L_{HF} w_2 - L_{PP} w_3, \\ L_C w_3 + L_{PE}^{(e)} w_4 + L_{PE}^{(n)} w_1 &= -L_{HF} w_3 - L_{PP} w_2, \\ L_C w_4 + L_{PE}^{(e)} w_3 + L_{PE}^{(n)} w_2 &= -L_{HF} w_4 - L_{PP} w_1. \end{aligned} \quad (15.50)$$

Безразмерные операторы L , входящие в уравнения (15.50), имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} L_C = \Delta + \frac{2E_e E_n}{E \hbar c} \frac{Z\alpha}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} \frac{1}{E} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) - \\ - \frac{m_e^2 c^4 E_n + m_n^2 c^4 E_e - E_e E_n E}{E \hbar^2 c^2}, \end{aligned} \quad (15.51)$$

$$L_{PE} = L_{PE}^{(e)} + L_{PE}^{(n)} = \frac{iZ\alpha}{r^2} \left(\frac{E_n}{E} \gamma_e \boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{e} - \frac{E_e}{E} \gamma_n \boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{e} \right), \quad (15.52)$$

$$L_{HF} = \frac{Z\alpha^2}{r^3} \frac{m_r c^2}{E_{AB}} \left(2\mathbf{1}^2 - \gamma_e \boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{1} - \gamma_n \boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{1} - \frac{\gamma_e \gamma_n}{2} (3(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{e})(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{e}) - \boldsymbol{\sigma}_e \boldsymbol{\sigma}_n) \right), \quad (15.53)$$

$$L_{PP} = \frac{Z\alpha^2}{r^3} \frac{m_r c^2}{E_{AB}} \frac{\gamma_e \gamma_n}{2} (3(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{e})(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{e}) - \boldsymbol{\sigma}_e \boldsymbol{\sigma}_n), \quad (15.54)$$

где $\boldsymbol{\sigma}_a$ — матрицы Паули.

Компонентами волновой функции (15.49) являются произведения двух спиноров. Произведения двух спиноров, как известно, распадаются на два неприводимых представления, соответствующие частицам со спином нуль и со спином единица соответственно. Используя в качестве базиса собственные функции матриц Паули $\sigma_{(e,n)z}$:

$$\sigma_z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle,$$

где $|\pm\rangle$ — двухрядные столбцы,

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

волновые функции этих двух состояний можно представить в следующем виде. Частице со спином нуль отвечает волновая функция

$$\chi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_e |-\rangle_n - |-\rangle_e |+\rangle_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Частице со спином 1 соответствуют следующие три волновые функции:

$$\chi_1^{(1)} = |+\rangle_e |+\rangle_n = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_e |-\rangle_n + |-\rangle_e |+\rangle_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\chi_{-1}^{(1)} = |-\rangle_e |-\rangle_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Произведения спиновых волновых функций $\chi^{(0)}$ и $\chi_m^{(1)}$ и шаровых функций определяют угловую зависимость волновых функций уравнения (15.49). При $s = 0$ угловая зависимость определяется следующим выражением:

$$\Omega_{j,l,m}^{(s=0)} = Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi^{(0)}. \quad (15.55)$$

В случае $s = 1$ угловая зависимость определяется по правилу сложения угловых моментов:

$$\Omega_{jlm}^{(s=1)} = (-1)^{l-1+m} \sqrt{2j+1} \sum_{m_1, m_2} \begin{pmatrix} l & 1 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} Y_{lm_1}(\theta, \varphi) \chi_{m_2}^{(1)}.$$

При данном l возникают три решения, отличающиеся величиной полного углового момента j и его проекции m . Они имеют вид

$$\begin{aligned} \Omega_{j=l+1, l, m}^{(s=1)} &= \sqrt{\frac{(l+m)(l+m+1)}{2(l+1)(2l+1)}} Y_{l, m-1} \chi_1^{(1)} + \\ &+ \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(l+1)(2l+1)}} Y_{l, m} \chi_0^{(1)} + \\ &+ \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m)}{2(l+1)(2l+1)}} Y_{l, m+1} \chi_{-1}^{(1)}, \\ \Omega_{j=l, l, m}^{(s=1)} &= -\sqrt{\frac{(l+m)(l-m+1)}{2l(l+1)}} Y_{l, m-1} \chi_1^{(1)} + \\ &+ \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} Y_{l, m} \chi_0^{(1)} + \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m)}{2l(l+1)}} Y_{l, m+1} \chi_{-1}^{(1)}, \\ \Omega_{j=l-1, l, m}^{(s=1)} &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m)}{2l(2l+1)}} Y_{l, m-1} \chi_1^{(1)} - \\ &- \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{l(2l+1)}} Y_{l, m} \chi_0^{(1)} + \sqrt{\frac{(l+m)(l+m+1)}{2l(2l+1)}} Y_{l, m+1} \chi_{-1}^{(1)}. \end{aligned} \quad (15.56)$$

Собственные функции (15.55) и (15.56) нормированы условием

$$\int \Omega_{jlm}^{(s)+} \Omega_{j'l'm'}^{(s')} \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{ss'}.$$

Таким образом, при заданной величине полного углового момента j и его проекции m получаем

$$w_n(\mathbf{r}) = f_n(r)\Omega_{j,l=j,m}^{(0)}(\theta, \varphi) + \sum_{\sigma=-1}^{+1} g_\sigma^{(n)}(r)\Omega_{j,l=j-\sigma,m}^{(1)}(\theta, \varphi), \quad (15.57)$$

где

$$\begin{aligned} \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)} &= \sqrt{\frac{(j+m-1)(j+m)}{2j(2j-1)}} Y_{j-1,m-1}\chi_1^{(1)} \\ &\quad + \sqrt{\frac{(j+m)(j-m)}{j(2j-1)}} Y_{j-1,m}\chi_0^{(1)} + \\ &\quad + \sqrt{\frac{(j-m)(j-m-1)}{2j(2j-1)}} Y_{j-1,m+1}\chi_{-1}^{(1)}, \\ \Omega_{j,l=j,m}^{(1)} &= -\sqrt{\frac{(j+m)(j-m+1)}{2j(j+1)}} Y_{j,m-1}\chi_1^{(1)} + \\ &\quad + \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}} Y_{j,m}\chi_0^{(1)} + \sqrt{\frac{(j+m+1)(j-m)}{2j(j+1)}} Y_{j,m+1}\chi_{-1}^{(1)}, \\ \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)} &= \sqrt{\frac{(j-m+1)(j-m+2)}{2(j+1)(2j+3)}} Y_{j+1,m-1}\chi_1^{(1)} - \\ &\quad - \sqrt{\frac{(j-m+1)(j+m+1)}{(j+1)(2j+3)}} Y_{j+1,m}\chi_0^{(1)} + \\ &\quad + \sqrt{\frac{(j+m+1)(j+m+2)}{2(j+1)(2j+3)}} Y_{j+1,m+1}\chi_{-1}^{(1)}. \end{aligned} \quad (15.58)$$

Отметим, что в случае $j = 0$ из трех решений (15.58) отличным от нуля остается только последнее. Оно имеет в этом случае вид

$$\Omega_{010}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(Y_{1,-1}\chi_1^{(1)} - Y_{10}\chi_0^{(1)} + Y_{11}\chi_{-1}^{(1)} \right). \quad (15.59)$$

Поэтому при расчете матричных элементов гамильтонианов взаимодействия случай $j = 0$ должен быть рассмотрен отдельно.

15.3.6. Матричные элементы операторов сверхтонких взаимодействий. Подставляя (15.57) в (15.50) и усредняя по угловым переменным, мы можем получить уравнения для радиальных функций $f(r)$ и $g_\sigma(r)$. Для этого нам необходимо определить матричные элементы операторов сверхтонких взаимодействий.

Ненулевые матричные элементы операторов $L_{PE}^{(e,n)}$ определяются следующими равенствами:

$$\begin{aligned}
\int \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)+}(\boldsymbol{\sigma}_e, n \mathbf{e}) \Omega_{j,l=j,m}^{(1)} \sin \theta d\theta d\varphi &= -i \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}, \\
\int \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)+}(\boldsymbol{\sigma}_e, n \mathbf{e}) \Omega_{j,l=j,m}^{(1)} \sin \theta d\theta d\varphi &= i \sqrt{\frac{j}{2j+1}}, \\
\int \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)+}(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{e}) \Omega_{j,l=j,m}^{(0)} \sin \theta d\theta d\varphi &= i \sqrt{\frac{j}{2j+1}}, \\
\int \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)+}(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{e}) \Omega_{j,l=j,m}^{(0)} \sin \theta d\theta d\varphi &= i \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}, \\
\int \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)+}(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{e}) \Omega_{j,l=j,m}^{(0)} \sin \theta d\theta d\varphi &= -i \sqrt{\frac{j}{2j+1}}, \\
\int \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)+}(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{e}) \Omega_{j,l=j,m}^{(0)} \sin \theta d\theta d\varphi &= -i \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}.
\end{aligned} \tag{15.60}$$

Матричные элементы первого слагаемого в операторе L_{HF} имеют тривиальный вид, поэтому остановимся на расчете матричных элементов оператора спин-орбитального взаимодействия, записав его в виде

$$L_1 = \frac{2\mu_B \mu_N}{r^3} (\gamma_e \boldsymbol{\sigma}_e + \gamma_n \boldsymbol{\sigma}_n) \mathbf{l}.$$

Следуя традиционной терминологии, мы называем это взаимодействие спин-орбитальным, хотя, более точно, это взаимодействие собственных магнитных моментов частиц с магнитным моментом, обусловленным их орбитальным движением.

Действуя непосредственно операторами $\boldsymbol{\sigma}_{e,n} \mathbf{l}$ на волновые функции (15.55) и (15.58), получаем

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{l}) \Omega_{jlm}^{(0)} &= \sqrt{j(j+1)} \Omega_{j,l=j,m}^{(1)}, \\
(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{l}) \Omega_{jlm}^{(0)} &= -\sqrt{j(j+1)} \Omega_{j,l=j,m}^{(1)}, \\
(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{l}) \Omega_{j,l=j,m}^{(1)} &= \sqrt{j(j+1)} \Omega_{jlm}^{(0)} - \Omega_{j,l=j,m}^{(1)}, \\
(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{l}) \Omega_{j,l=j,m}^{(1)} &= -\sqrt{j(j+1)} \Omega_{jlm}^{(0)} - \Omega_{j,l=j,m}^{(1)}, \\
(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{l}) \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)} &= (j-1) \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)}, \\
(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{l}) \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)} &= (j-1) \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)}, \\
(\boldsymbol{\sigma}_e \mathbf{l}) \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)} &= -(j+2) \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)}, \\
(\boldsymbol{\sigma}_n \mathbf{l}) \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)} &= -(j+2) \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)}.
\end{aligned} \tag{15.61}$$

Для диагональных элементов энергии спин-орбитального взаимодействия получаем

$$\begin{aligned}\langle s=0|L_1|s=0\rangle &= 0, \\ \langle j, l=j-1, m, s=1|L_1|j, l=j-1, m, s=1\rangle &= \frac{2\mu_B\mu_N}{r^3}(\gamma_e + \gamma_n)(j-1), \\ \langle j, l=j, m, s=1|L_1|j, l=j, m, s=1\rangle &= -\frac{2\mu_B\mu_N}{r^3}(\gamma_e + \gamma_n), \\ \langle j, l=j+1, m, s=1|L_1|j, l=j+1, m, s=1\rangle &= -\frac{2\mu_B\mu_N}{r^3}(\gamma_e + \gamma_n)(j+2).\end{aligned}$$

Для того чтобы определить явный вид зависимости указанных матричных элементов от квантовых чисел, нам необходимо усреднить множитель $1/r^3$ по радиальным волновым функциям. Однако, полагая, что в нулевом приближении радиальные волновые функции зависят лишь от квантового числа l , из полученных формул мы можем уже сделать некоторые предварительные выводы о соотношении энергий различных состояний с одинаковыми значениями l .

Из полученных выражений следует, что для частиц с полуцелым спином, имеющих противоположную по знаку величину магнитного момента, спин-орбитальное взаимодействие делает энергетически более выгодным состояние с наименьшим значением полного углового момента j при данном l . Спин-орбитальное взаимодействие стремится уменьшить величину магнитного момента атома и величину его полного углового момента.

Следующее слагаемое в операторе L_{HF} , имеющее вид

$$L_2 = \frac{\mu_B\mu_N\gamma_e\gamma_n}{r^3} (3(\mathbf{s}_e\mathbf{e})(\mathbf{s}_n\mathbf{e}) - \mathbf{s}_e\mathbf{s}_n), \quad (15.62)$$

традиционно называют спин-спиновым взаимодействием, хотя, как мы видели, оно представляет собой взаимодействие собственных магнитных моментов частиц.

Прежде чем переходить к определению матричных элементов оператора (15.62), его удобно выразить через полный спин атома. Это можно сделать следующим образом:

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{s}_e^2 + \mathbf{s}_n^2 + 2(\mathbf{s}_e\mathbf{s}_n) = \frac{3}{2} + 2(\mathbf{s}_e\mathbf{s}_n),$$

следовательно

$$(\mathbf{s}_e\mathbf{s}_n) = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^2 - \frac{3}{2}).$$

С другой стороны,

$$(\mathbf{S}\mathbf{e})^2 = (\mathbf{s}_e\mathbf{e})^2 + (\mathbf{s}_n\mathbf{e})^2 + 2(\mathbf{s}_e\mathbf{e})(\mathbf{s}_n\mathbf{e}) = \frac{1}{2} + 2(\mathbf{s}_e\mathbf{e})(\mathbf{s}_n\mathbf{e}),$$

откуда получаем

$$(\mathbf{s}_e \mathbf{e}) (\mathbf{s}_n \mathbf{e}) = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{S}_e)^2 - \frac{1}{2} \right].$$

Окончательно для гамильтониана спин-спинового взаимодействия имеем

$$H_{ss} = \frac{2\mu_B \mu_N \gamma_e \gamma_n}{r^3} \left(3 (\mathbf{S}_e)^2 - \mathbf{S}^2 \right). \quad (15.63)$$

Из (15.63) следует, что энергия спин-спинового взаимодействия равна нулю в состоянии $\Omega^{(0)}$. Для состояний с $s = 1$

$$\mathbf{S}^2 \Omega_{jlm}^{(1)} = s(s+1) \Omega_{jlm}^{(1)} = 2 \Omega_{jlm}^{(1)}. \quad (15.64)$$

Действие оператора (\mathbf{S}_e) на волновые функции $\chi_m^{(1)}$ определяется следующими выражениями:

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_e) \chi_1^{(1)} &= -i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(Y_{10} \chi_1^{(1)} - Y_{1,+1} \chi_0^{(1)} \right), \\ (\mathbf{S}_e) \chi_0^{(1)} &= -i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(Y_{1,-1} \chi_1^{(1)} - Y_{1,+1} \chi_{-1}^{(1)} \right), \\ (\mathbf{S}_e) \chi_{-1}^{(1)} &= -i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(Y_{1,-1} \chi_0^{(1)} - Y_{10} \chi_{-1}^{(1)} \right), \end{aligned}$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции. Используя эти равенства и формулу, выражающую матричные элементы от сферических функций через $3j$ -символы,

$$\begin{aligned} \langle l_1 m_1 | Y_{lm} | l_2 m_2 \rangle &= (-1)^{m_1} i^{-l_1+l_2+l} \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ &\times \sqrt{\frac{(2l+1)(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi}}, \end{aligned}$$

для матричных элементов от первого слагаемого в (15.63) получаем

$$\begin{aligned} \int \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)+} (\mathbf{S}_e)^2 \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)} \sin \theta d\theta d\varphi &= \frac{j+1}{2j+1}, \\ \int \Omega_{j,l=j,m}^{(1)+} (\mathbf{S}_e)^2 \Omega_{j,l=j,m}^{(1)} \sin \theta d\theta d\varphi &= 1, \\ \int \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)+} (\mathbf{S}_e)^2 \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)} \sin \theta d\theta d\varphi &= \frac{j}{2j+1}, \\ \int \Omega_{j,l=j+1,m}^{(1)+} (\mathbf{S}_e)^2 \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)} \sin \theta d\theta d\varphi &= -\frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1}, \\ \int \Omega_{j,l=j,m}^{(1)+} (\mathbf{S}_e)^2 \Omega_{j,l=j-1,m}^{(1)} \sin \theta d\theta d\varphi &= 0. \end{aligned} \quad (15.65)$$

Спин-спиновое взаимодействие связывает лишь состояния с ненулевой проекцией спина. Сумма диагональных матричных элементов равна 2. Следовательно, с учетом (15.64) сумма диагональных элементов оператора $3(\mathbf{Se})^2 - \mathbf{S}^2$ равна нулю, что непосредственно следует из вида указанного оператора.

Для диагональных элементов энергии спин-спинового взаимодействия, усредненных по угловым переменным, получаем

$$\begin{aligned} \langle j, l = j - 1, m | H_{ss} | j, l = j - 1, m \rangle &= -\frac{2\mu_B \mu_N \gamma_e \gamma_n}{r^3} \frac{j - 1}{2j + 1}, \\ \langle j, l = j, m | H_{ss} | j, l = j, m \rangle &= \frac{2\mu_B \mu_N \gamma_e \gamma_n}{r^3}, \\ \langle j, l = j + 1, m | H_{ss} | j, l = j + 1, m \rangle &= -\frac{2\mu_B \mu_N \gamma_e \gamma_n}{r^3} \frac{j + 2}{2j + 1}. \end{aligned}$$

С учетом замечаний, сделанных при обсуждении матричных элементов гамильтониана спин-орбитального взаимодействия, на основании полученных формул мы можем сделать некоторые предварительные выводы о характере сверхтонкой структуры энергетического спектра атома, связанной со спин-спиновым взаимодействием. Мы видим, что для частиц с полуцелым спином, имеющих противоположную по знаку величину магнитного момента, спин-спиновое взаимодействие делает энергетически более выгодным состояние с наименьшим j при данном l . Спин-спиновое взаимодействие стремится уменьшить величину суммарного магнитного момента атома и величину его полного углового момента. Энергия спин-спинового взаимодействия в антисимметричном состоянии с противоположно направленными спинами равна нулю и является положительной в симметричном состоянии с противоположно направленными спинами.

Как мы отмечали выше, в случае $j = 0$ из четырех решений (15.55) и (15.58) ненулевыми остаются лишь два, поскольку при полном спине, равном единице, решение с $j = 0$ может быть получено только при $l = 1$. В этом случае матричные элементы оператора спин-орбитального взаимодействия имеют вид

$$\begin{aligned} (\sigma_1 \mathbf{1}) \Omega_0^{(0)} &= 0, & (\sigma_2 \mathbf{1}) \Omega_0^{(0)} &= 0, \\ (\sigma_1 \mathbf{1}) \Omega_{010}^{(1)} &= -2\Omega_{010}^{(1)}, & (\sigma_2 \mathbf{1}) \Omega_{010}^{(1)} &= -2\Omega_{010}^{(1)}, \end{aligned}$$

что находится в соответствии с общей формулой (15.61). Матричные элементы от оператора спин-спинового взаимодействия принимают в этом случае значение

$$\langle 010 | 3(\mathbf{Se})^2 - \mathbf{S}^2 | 010 \rangle = -1.$$

Этот матричный элемент не описывается формулой (15.65), полученной нами при условии $j > 0$.

Угловые зависимости матричных элементов оператора L_{PP} совпадают с угловыми зависимостями оператора (15.62), поэтому отдельного рассмотрения не требуют.

Отметим в заключение, что при операции пространственной инверсии волновая функция (15.49) преобразуется следующим образом:

$$S_P^{(e)} S_P^{(n)} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} = \lambda_P^{(e)} \lambda_P^{(n)} \begin{pmatrix} w_1 \\ -w_2 \\ -w_3 \\ w_4 \end{pmatrix},$$

поэтому, учитывая свойства преобразования спиноров при операции пространственной инверсии, решение уравнения (15.48) можно искать в виде

$$\begin{aligned} w_1(\mathbf{r}) &= f_1(r) \Omega_{j,l=j,m}^{(0)}(\theta, \varphi) + g_0^{(1)}(r) \Omega_{j,l=j,m}^{(1)}(\theta, \varphi), \\ w_2(\mathbf{r}) &= \sum_{\sigma=\pm 1} g_\sigma^{(2)}(r) \Omega_{j,l=j-\sigma,m}^{(1)}(\theta, \varphi), \\ w_3(\mathbf{r}) &= \sum_{\sigma=\pm 1} g_\sigma^{(3)}(r) \Omega_{j,l=j-\sigma,m}^{(1)}(\theta, \varphi), \\ w_4(\mathbf{r}) &= f_4(r) \Omega_{j,l=j,m}^{(0)}(\theta, \varphi) + g_0^{(4)}(r) \Omega_{j,l=j,m}^{(1)}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (15.66)$$

Второе линейно независимое решение получается заменой

$$w'_1 = w_2, \quad w'_2 = w_1, \quad w'_3 = w_4, \quad w'_4 = w_3.$$

15.3.7. Уравнения для радиальных волновых функций.

В уравнениях (15.50)–(15.54) $E = E_e + E_n$ и $E_e = m_e c^2 - \Delta E_e$, $E_n = m_n c^2 - \Delta E_n$. В случае покоящегося атома из условия $\mathbf{p}_e + \mathbf{p}_n = \mathbf{0}$ следует, что $\Delta E_n / \Delta E_e \sim m_e / m_n \ll 1$. Учитывая это соотношение, несложно показать, что

$$\begin{aligned} \frac{E_e E_n}{E} &\approx \frac{m_r}{m_e} E_e, \quad \frac{1}{E} \left(\frac{E_e^2}{m_e c^2} + \frac{E_n^2}{m_n c^2} \right) \approx 1, \\ \frac{m_e^2 c^4 E_n + m_n^2 c^4 E_e + E_e E_n E}{E} &\approx m_e^2 c^4 - E_e^2, \end{aligned} \quad (15.67)$$

где $m_r = m_e m_n / (m_e + m_n)$ — приведенная масса электрона.

Опустим вначале в уравнении (15.50) слагаемые в правой части, которые пропорциональны $1/r^3$, поскольку оставшиеся слагаемые, как мы видели в гл. 12, позволяют получить точное решение. Уравнения (15.50) являются системой уравнений для восьми функций $f_{1,4}$, $g_0^{(1,4)}$, $g_{\pm 1}^{(2,3)}$, $g_{\pm 1}^{(2,3)}$. Выпишем уравнения для функций w_1 и w_2 , по-

сколько оставшиеся уравнения имеют сходную структуру. Подставляя (15.66) в (15.50), с учетом приближений (15.67) получаем

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2E_e m_r}{\hbar c m_e} \frac{Z\alpha}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - j(j+1)}{r^2} - \kappa^2 \right) f_1 + \\ & + \gamma_e \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_e} \left(\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} g_{-1}^{(2)} + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} g_{+1}^{(2)} \right) + \\ & + \gamma_n \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_n} \left(\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} g_{-1}^{(3)} + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} g_{+1}^{(3)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (15.68)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2E_e m_r}{\hbar c m_e} \frac{Z\alpha}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - j(j+1)}{r^2} - \kappa^2 \right) g_0^{(1)} + \\ & + \gamma_e \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_e} \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} g_{-1}^{(2)} - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} g_{+1}^{(2)} \right) - \\ & - \gamma_n \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_n} \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} g_{-1}^{(3)} - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} g_{+1}^{(3)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (15.69)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2E_e m_r}{\hbar c m_e} \frac{Z\alpha}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - (j+1)(j+2)}{r^2} - \kappa^2 \right) g_{-1}^{(2)} - \\ & - \gamma_e \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_e} \left(\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} f_1 + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} g_0^{(1)} \right) - \\ & - \gamma_n \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_n} \left(\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} f_4 - \sqrt{\frac{j}{2j+1}} g_0^{(4)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (15.70)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2E_e m_r}{\hbar c m_e} \frac{Z\alpha}{r} + \frac{Z^2 \alpha^2 - j(j-1)}{r^2} - \kappa^2 \right) g_{+1}^{(2)} - \\ & - \gamma_e \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_e} \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} f_1 - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} g_0^{(1)} \right) - \\ & - \gamma_n \frac{Z\alpha}{r^2} \frac{m_r}{m_n} \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} f_4 + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} g_0^{(4)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (15.71)$$

Решение системы восьми связанных уравнений ищется в виде

$$f_i(r) = f_{0i} G(\nu, r), \quad g_\sigma^{(i)}(r) = g_{0\sigma}^{(i)} G(\nu, r),$$

где

$$G(\nu, r) = \exp(-\kappa r) r^{\nu-1} F\left(\nu - \frac{E_e m_r Z\alpha}{\hbar c m_e \kappa}, 2\nu, 2\kappa r\right), \quad (15.72)$$

$F(p, q, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. Параметр ν определяется из условия существования нетривиальных решений системы линейных алгебраических уравнений для 8 коэффициентов $f_{0i}, g_{0\sigma}^{(i)}$.

15.3.8. Теория возмущений. До сих пор мы учли в уравнении (15.48) лишь слагаемые, которые спадают с расстоянием не быстрее чем $1/r^2$. Слагаемые, спадающие с расстоянием как $1/r^3$, малы. Действительно, для отношения среднего значения оператора кинетической энергии $\langle K \rangle = \left\langle \left(\hbar^2/2m_r \right) \Delta \right\rangle$, входящего в (15.48), и среднего значения $\langle H_{HF} + H_{PP} \rangle$ получаем

$$\frac{\langle H_{HF} + H_{PP} \rangle}{\langle K \rangle} \approx \frac{Ze^2}{E_{aB}} = Z\alpha^2 \frac{m_r}{m_n}.$$

Следовательно, для учета взаимодействий, спадающих как $1/r^3$, мы можем воспользоваться теорией возмущений.

Обсудим сначала общие уравнения стационарной теории возмущений. Положим, что нам известно решение задачи на собственные значения для уравнения

$$H_0(E_n) \Psi_n(\mathbf{r}) = 0, \quad (15.73)$$

где H_0 — гамильтониан уравнения (8.3) или совпадающий с ним по структуре гамильтониан $H_C + H_{PE}$ уравнения (15.48). Нам необходимо найти приближенные волновые функции уравнения

$$(H_0(E) + \delta H) \Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (15.74)$$

Будем искать волновые функции уравнения (15.74) в виде разложения по собственным функциям уравнения (15.73):

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{r}). \quad (15.75)$$

Подставляя (15.75) в (15.74), получаем

$$\sum_m c_m \frac{E_m - E}{m_0 c^2} \left(\frac{E + E_m}{2} - U(\mathbf{r}) \right) \Psi_m(\mathbf{r}) + \sum_m c_m \delta H \Psi_m(\mathbf{r}) = 0. \quad (15.76)$$

Варируя функционал энергии уравнения (15.74) в пространстве волновых функций (15.75) и определяя последовательные минимумы, можно, в принципе, найти решение уравнения (15.74) и при произвольном соотношении между H_0 и δH .

В случае когда поправки невелики, $|E - E_n| \ll E_n$, пользуясь условием нормировки волновых функций, получаем

$$(E_n - E) c_n + \sum_m \delta H_{nm} c_m = 0, \quad (15.77)$$

где $\delta H_{nm} = \int \bar{\Psi}_n \delta H \Psi_m dV$. Если отличны от нуля только диагональные матричные элементы оператора $\delta H_{nm} = \delta H_{nm} \delta_{nm}$, то из (15.77) получаем значение энергии n -го уровня E'_n с учетом возмущения:

$$E'_n = E_n + \delta H_{nn}. \quad (15.78)$$

Если оператор δH имеет отличные от нуля недиагональные элементы, например, связывает два соседних уровня $\delta H_{n,n+1} \neq 0$, расстояние между которыми сопоставимо с величиной поправок, $|E_n - E_{n+1}| \approx |\langle \delta H \rangle|$, то система уравнений (15.77) принимает вид

$$\begin{aligned} (E_n + \delta H_{nn} - E) c_n + \delta H_{n,n+1} c_{n+1} &= 0, \\ (E_{n+1} + \delta H_{n+1,n+1} - E) c_{n+1} + \delta H_{n+1,n} c_n &= 0 \end{aligned} \quad (15.79)$$

и для энергии уровней получаем

$$\begin{aligned} E^{(1,2)} &= \frac{E_n + E_{n+1} + \delta H_{nn} + \delta H_{n+1,n+1}}{2} \pm \\ &\pm \sqrt{\left(\frac{E_n - E_{n+1} + \delta H_{nn} - \delta H_{n+1,n+1}}{2}\right)^2 + \delta H_{n+1,n} \delta H_{n,n+1}}. \end{aligned} \quad (15.80)$$

Если поправки, вносимые возмущением, малы по сравнению с расстоянием между уровнями, связанными δH , т. е. $|\delta H_{nn}| \ll |E_n - E_{n+1}|$, то из (15.80) получаем

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= E_n + \delta E_n \approx E_n + \delta H_{nn} + \frac{\delta H_{n+1,n} \delta H_{n,n+1}}{E_n - E_{n+1}}, \\ E^{(2)} &= E_{n+1} + \delta E_{n+1} \approx E_{n+1} + \delta H_{n+1,n+1} - \frac{\delta H_{n+1,n} \delta H_{n,n+1}}{E_n - E_{n+1}}. \end{aligned}$$

Следовательно, поправки, обусловленные перекрестным взаимодействием двух уровней, сдвигают энергии уровней в противоположные стороны.

Состояние с энергией $E^{(1)}$ является суперпозицией невозмущенного состояния n с примесью невозмущенного состояния $n + 1$. Амплитуда примеси определяется из (15.79):

$$c_{n+1} = \frac{\delta H_{n+1,n}}{E^{(1)} - E_{n+1} - \delta H_{n+1,n+1}} c_n \approx \frac{\delta H_{n+1,n}}{E_n - E_{n+1}} c_n.$$

Таким образом, в случае если энергия взаимодействия много меньше энергетического расстояния между уровнями невозмущенной системы, амплитуда примесного состояния невелика.

Ввиду громоздкости получающихся выражений мы не будем здесь приводить аналитические выражения для поправок, обусловленных слагаемыми $H_{HF} + H_{PP}$. Отметим лишь, что результаты численных расчетов, основанных на использовании указанного алгоритма, приводят к хорошему согласию с данными экспериментальных измерений.

15.3.9. Случай $j = 0$. В случае $j = 0$ число уравнений (15.68)–(15.71) сокращается вдвое, поскольку в этом случае из четырех линейно независимых спинов второго ранга $\Omega_{jlm}^{(s)}$ остается два и вместо (15.66) мы получаем

$$w_1 = f_1 \Omega_{000}^{(0)}, \quad w_2 = g_{-1}^{(2)} \Omega_{010}^{(1)}, \quad w_3 = g_{-1}^{(3)} \Omega_{010}^{(1)}, \quad w_4 = f_4 \Omega_{000}^{(0)}, \quad (15.81)$$

или

$$w_1 = g_{-1}^{(1)}\Omega_{010}^{(1)}, \quad w_2 = f_2\Omega_{000}^{(0)}, \quad w_3 = f_3\Omega_{000}^{(0)}, \quad w_4 = g_{-1}^{(4)}\Omega_{010}^{(1)}. \quad (15.82)$$

В случае волновой функции вида (15.81) параметр ν в (15.72) имеет вид

$$\nu_i = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - 4\gamma_i} \right), \quad (15.83)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= -1 + Z^2\alpha^2 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2 \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} + \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2}, \\ \gamma_2 &= -1 + Z^2\alpha^2 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2 \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} - \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2}, \\ \gamma_3 &= -1 + Z^2\alpha^2 - \sqrt{1 - Z^2\alpha^2 \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} + \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2}, \\ \gamma_4 &= -1 + Z^2\alpha^2 - \sqrt{1 - Z^2\alpha^2 \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} - \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2}. \end{aligned}$$

Решения, удовлетворяющие граничным условиям при $r = 0$ и $r \rightarrow \infty$, возникают при выполнении условия

$$\nu_i - \frac{E_e Z \alpha m_r}{\hbar c m_e \kappa} = -n_r,$$

где n_r — неотрицательное число, называемое радиальным квантовым числом. Поэтому для энергетического спектра получаем

$$E_{n,j=0}^{(i=1,\dots,4)} = \frac{m_e c^2 (n_r + \nu_i)}{\sqrt{(n_r + \nu_i)^2 + (Z \alpha m_r / m_e)^2}}. \quad (15.84)$$

Следовательно, положение энергетических уровней электрона $\Delta E = m_e c^2 - E_e$ определяется выражением

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,j=0}^{(i=1,\dots,4)} &= \\ &= \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z \alpha m_r}{(n_r + \nu_i) m_e} \right)^2} \left(1 + \sqrt{1 + \left(\frac{Z \alpha m_r}{(n_r + \nu_i) m_e} \right)^2} \right)} \left(\frac{Z \alpha m_r}{(n_r + \nu_i) m_e} \right)^2. \end{aligned} \quad (15.85)$$

Собственные функции, отвечающие собственным значениям (15.84), имеют вид

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Omega_{000}^{(0)} \\ -\varsigma_1 \Omega_{010}^{(1)} \\ -\varsigma_1 \Omega_{010}^{(1)} \\ \Omega_{000}^{(0)} \end{pmatrix} G(\nu_1, r), \quad \Psi_2(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -\Omega_{000}^{(0)} \\ \varsigma_2 \Omega_{010}^{(1)} \\ -\varsigma_2 \Omega_{010}^{(1)} \\ \Omega_{000}^{(0)} \end{pmatrix} G(\nu_2, r), \quad (15.86)$$

$$\Psi_3(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varsigma_1 \Omega_{000}^{(0)} \\ -\Omega_{010}^{(1)} \\ -\Omega_{010}^{(1)} \\ \varsigma_1 \Omega_{000}^{(0)} \end{pmatrix} G(\nu_3, r), \quad \Psi_4(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varsigma_2 \Omega_{000}^{(0)} \\ -\Omega_{010}^{(1)} \\ \Omega_{010}^{(1)} \\ -\varsigma_2 \Omega_{000}^{(0)} \end{pmatrix} G(\nu_4, r), \quad (15.87)$$

где $G(\nu_i, r)$ определяется выражением (15.72) и

$$\varsigma_1 = \frac{Z\alpha \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} + \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)}{1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2 \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} + \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2}},$$

$$\varsigma_2 = \frac{Z\alpha \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} - \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)}{1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2 \left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} - \gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2}}.$$

Для волновой функции в виде (15.82) энергетический спектр снова определяется выражением (15.84), а волновые функции имеют вид

$$\Psi_5(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varsigma_1 \Omega_{010}^{(1)} \\ -\Omega_{000}^{(0)} \\ -\Omega_{000}^{(0)} \\ \varsigma_1 \Omega_{010}^{(1)} \end{pmatrix} G(\nu_1, r), \quad \Psi_6(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varsigma_2 \Omega_{010}^{(1)} \\ -\Omega_{000}^{(0)} \\ \Omega_{000}^{(0)} \\ -\varsigma_2 \Omega_{010}^{(1)} \end{pmatrix} G(\nu_2, r). \quad (15.88)$$

$$\Psi_7(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Omega_{010}^{(1)} \\ -\varsigma_1 \Omega_{000}^{(0)} \\ -\varsigma_1 \Omega_{000}^{(0)} \\ \Omega_{010}^{(1)} \end{pmatrix} G(\nu_3, r), \quad \Psi_8(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -\Omega_{010}^{(1)} \\ \varsigma_2 \Omega_{000}^{(0)} \\ -\varsigma_2 \Omega_{000}^{(0)} \\ \Omega_{010}^{(1)} \end{pmatrix} G(\nu_4, r). \quad (15.89)$$

Так же как и в случае движения частицы в кулоновском поле, решения (15.86)–(15.89) двукратно вырождены относительно пар частиц и античастиц.

15.3.10. Внутренняя четность. Функция, дираковски сопряженная к (15.49), имеет вид: $\bar{\Psi} = (w_1^+, -w_2^+, -w_3^+, w_4^+)$, поэтому, учитывая, что в случае атома водорода $\varsigma_{1,2} \ll 1$, получаем: $\bar{\Psi}_{1,2,7,8} \Psi_{1,2,7,8} > 0$, $\bar{\Psi}_{3,4,5,6} \Psi_{3,4,5,6} < 0$. В случае движения частицы в кулоновском поле мы оставляли решения, соответствующие частицам, для которых $\bar{\Psi}\Psi > 0$. Решения двухчастичной задачи (15.50) с $\bar{\Psi}\Psi > 0$ соответствуют паре частиц или паре античастиц, решения с $\bar{\Psi}\Psi < 0$ соответствуют случаю, когда двухчастичная волновая функция является произведением одночастичных волновых функций, одна из которых соответствует частице, а другая — античастице. Преобразования

частица–античастица осуществляются операторами $\gamma_5^{(e)}$ и $\gamma_5^{(n)}$, действие которых на волновую функцию (15.49) определяется равенствами

$$\gamma_5^{(e)} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} w_2 \\ w_1 \\ w_4 \\ w_3 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5^{(n)} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} w_3 \\ w_4 \\ w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}.$$

Волновые функции, отвечающие одному и тому же значению энергии, связаны следующими преобразованиями:

$$\begin{aligned} \gamma_5^{(e)} \Psi_1 &= \Psi_5, & \gamma_5^{(n)} \Psi_1 &= \Psi_5, & \gamma_5^{(e)} \Psi_3 &= \Psi_7, & \gamma_5^{(n)} \Psi_3 &= \Psi_7, \\ \gamma_5^{(e)} \Psi_2 &= -\Psi_6, & \gamma_5^{(n)} \Psi_2 &= \Psi_6, & \gamma_5^{(e)} \Psi_4 &= -\Psi_8, & \gamma_5^{(n)} \Psi_4 &= \Psi_8. \end{aligned}$$

Таким образом, операторы $\gamma_5^{(e)}$ и $\gamma_5^{(n)}$ действуют одинаковым образом на волновые функции с нечетными номерами, а их действие на волновые функции с четными номерами отличается по знаку.

Введем оператор внутренней четности

$$\Gamma_5 = \gamma_5^{(e)} \gamma_5^{(n)}. \quad (15.90)$$

Этот оператор преобразует каждую из частиц в ее античастицу. Действие этого оператора на волновую функцию (15.49) определяется следующим выражением:

$$\gamma_5^{(e)} \gamma_5^{(n)} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_4 \\ w_3 \\ w_2 \\ w_1 \end{pmatrix}.$$

Действуя оператором (15.90) на волновые функции (15.86)–(15.89), получаем

$$\Gamma_5 \Psi_{1,3,5,7} = \Psi_{1,3,5,7}, \quad \Gamma_5 \Psi_{2,4,6,8} = -\Psi_{2,4,6,8}. \quad (15.91)$$

Следует отметить, что операторы $\gamma_5^{(e)}$ и $\gamma_5^{(n)}$ коммутируют по отдельности с гамильтонианом двухчастичной задачи и оператор Γ_5 также коммутирует с гамильтонианом двухчастичной задачи, поэтому указанные свойства симметрии волновых функций остаются неизменными при действии на атом внешнего электромагнитного поля. Это приводит к очень важному следствию. Как видно из формул (15.83)–(15.84), энергетические уровни двухчастичных систем, имеющих различную внутреннюю четность, отличаются друг от друга. Однако эти отличия не могут быть зарегистрированы в оптических спектрах, поскольку электромагнитное поле не может изменить внутреннюю четность двухчастичной системы.

В гл. 7 было показано, что матрица γ_5 является оператором *CPT*-преобразования, поэтому внутренняя четность определяет симметрию волновой функции системы частиц относительно *CPT*-преобразова-

ния. Различия во внутренней структуре системы частиц, имеющих различную внутреннюю четность, легко пояснить следующим образом. Определим величину радиальной проекции вектора поляризации $\mathbf{eP}^{(i)} = -i\mu_e \bar{\Psi}_i \boldsymbol{\alpha} \Psi_i$ в состояниях, описываемых волновыми функциями (15.86) и (15.89). Для них получаем

$$\begin{aligned} d_e^{(1)} &= \int \mathbf{eP}_e^{(1)} dV = -4\mu_B \gamma_e \varsigma_1, & d_n^{(1)} &= \int \mathbf{eP}_n^{(1)} dV = -4\mu_N \gamma_n \varsigma_1, \\ d_e^{(2)} &= \int \mathbf{eP}_e^{(2)} dV = -4\mu_B \gamma_e \varsigma_2, & d_n^{(2)} &= \int \mathbf{eP}_n^{(2)} dV = 4\mu_N \gamma_n \varsigma_2, \\ d_e^{(3)} &= \int \mathbf{eP}_e^{(3)} dV = 4\mu_B \gamma_e \varsigma_1, & d_n^{(3)} &= \int \mathbf{eP}_n^{(3)} dV = 4\mu_N \gamma_n \varsigma_1, \\ d_e^{(4)} &= \int \mathbf{eP}_e^{(4)} dV = 4\mu_B \gamma_e \varsigma_2, & d_n^{(4)} &= \int \mathbf{eP}_n^{(4)} dV = -4\mu_N \gamma_n \varsigma_2. \end{aligned}$$

Таким образом, в состояниях с положительной внутренней четностью направления векторов поляризации обеих частиц совпадают, а в состояниях с отрицательной внутренней четностью направления векторов поляризации противоположны.

Несложно видеть, что решения (15.86) и (15.88) соответствуют nS -состояниям, а решения (15.87) и (15.89) соответствуют nP -состояниям двухчастичной задачи. В nS -состояниях вектор \mathbf{d}_e ориентирован против направления внутриатомного поля, а в nP -состояниях совпадает с ним. В атомах с положительной внутренней четностью вектор \mathbf{d}_n совпадает по направлению с вектором \mathbf{d}_e , а в атомах с отрицательной внутренней четностью противоположен ему. В водородоподобных системах, у которых $|\mu_e| \gg |\mu_n|$ (как в атоме водорода), nS -уровни сдвигаются вверх, а nP -уровни — вниз. Величина сдвига nS - и nP -состояний четных атомных систем относительно нечетных определяется следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta E(nS)}{m_e c^2} &= \frac{(n_r + \nu_1)}{\sqrt{(n_r + \nu_1)^2 + (Z\alpha m_r/m_e)^2}} - \frac{(n_r + \nu_2)}{\sqrt{(n_r + \nu_2)^2 + (Z\alpha m_r/m_e)^2}} = \\ &= \frac{2\gamma_e \gamma_n}{n^3} \frac{m_r}{M} (Z\alpha)^4 + \frac{2\gamma_e \gamma_n}{n^5} \frac{m_r}{M} [4n^2 + 6n - 3 - \\ &\quad - \left(\left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} \right)^2 + \left(\gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2 \right) n(n+3)] (Z\alpha)^6 + \dots, \quad (15.92) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta E(nP)}{m_e c^2} &= \frac{(n_r + \nu_3)}{\sqrt{(n_r + \nu_3)^2 + (Z\alpha m_r/m_e)^2}} - \frac{(n_r + \nu_4)}{\sqrt{(n_r + \nu_4)^2 + (Z\alpha m_r/m_e)^2}} = \\ &= -\frac{2\gamma_e \gamma_n}{3n^3} \frac{m_r}{M} (Z\alpha)^4 - \frac{2\gamma_e \gamma_n}{27n^5} \frac{m_r}{M} [4n^2 + 18n - 27 + \\ &\quad + \left(\left(\gamma_e \frac{m_r}{m_e} \right)^2 + \left(\gamma_n \frac{m_r}{m_n} \right)^2 \right) n(11n+9)] (Z\alpha)^6 + \dots, \quad (15.93) \end{aligned}$$

где $M = m_e + m_n$, $n = n_r + 1$ — главное квантовое число для nS -состояний и $n = n_r + 2$ — главное квантовое число для nP -состояний. Учитывая, что $m_e c^2 \alpha^2 = 2Ry$, несложно видеть, что первый член разложения сдвигов по степеням α пропорционален $(Z^4 \alpha^2 m_r / n^3 M) Ry$.

Положение энергетических уровней, определяемое формулой (15.85), зависит от соотношения масс электрона и ядра m_e/m_n . Оценим величину сдвигов уровней (15.85) по отношению к дираковскому спектру (12.89) в пределе бесконечно тяжелого ядра $m_n \rightarrow \infty$. Для четных атомных систем получаем

$$\frac{\Delta E_{even}(nS)}{m_e c^2} = \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} \left[\left(\gamma_e + \gamma_n \frac{m_e}{m_n} \right)^2 - 1 \right] + \dots,$$

$$\frac{\Delta E_{even}(nP)}{m_e c^2} = -\frac{Z^4 \alpha^4}{6n^3} \left[\left(\gamma_e + \gamma_n \frac{m_e}{m_n} \right)^2 - 1 \right] + \dots$$

Для нечетных атомных систем

$$\frac{\Delta E_{odd}(nS)}{m_e c^2} = \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} \left[\left(\gamma_e - \gamma_n \frac{m_e}{m_n} \right)^2 - 1 \right] + \dots,$$

$$\frac{\Delta E_{odd}(nP)}{m_e c^2} = -\frac{Z^4 \alpha^4}{6n^3} \left[\left(\gamma_e - \gamma_n \frac{m_e}{m_n} \right)^2 - 1 \right] + \dots$$

Сравнивая последние формулы с формулами (12.93), несложно видеть, что учет спина ядра атома приводит к замене величины магнитного момента электрона на суммарный магнитный момент $|\mu_e| + |\mu_n|$ для четных атомных систем и на разностный момент $|\mu_e| - |\mu_n|$ — для нечетных атомных систем.

Таким образом, проведенный анализ показал, что выбор одной из двух волновых функций, отвечающих одной и той же энергии, зависит от структуры атомной системы, т.е. от того, являются обе частицы системы частицами либо античастицами или одна из них частица, а другая античастица. Выбор одной из двух возможных спектральных серий зависит от внутренней четности двухчастичной системы.

Замечания

Как было отмечено во введении к настоящей главе, представленное в ней изложение относится к стандартному спектру состояний водородоподобного атома. Это обусловлено тем, что далеко не все приближения, которые мы здесь использовали, являются обоснованными и при учете спектра состояний зеркальных частиц. Однако учитывая успехи, достигнутые в последнее время в области прецизионной лазерной спектроскопии, содержание этой главы представляет самостоятельный интерес, поскольку позволяет сопоставить результаты расчетов сверхтонких сдвигов водородоподобных атомов и ионов с имеющимися экспериментальными данными. Такое сравнение либо дает аргументы в пользу развиваемых представлений, либо заставляет задуматься над причинами возникающих расхождений.

Список литературы

1. Font R. *Int. J. Mod. Phys. D*, **13**, 2161 (2004).
2. Окунь Л. Б. *УФН*, **177**, 397 (2007).
3. Pendlebury J. M. and Hinds E. A. *NIMPS A*, **440**, 471 (2000).
4. Собельман И. И., Сорокин В. Н., *УФН*, **175**, 979 (2005).
5. Naruki M., Fukao Y., Funahashi H., *et al.*, *PRL*, **96**, 092301 (2006).
6. Muto R., Chiba J., En'yo H., *et al.*, *PRL*, **98**, 042501 (2007).
7. Sakuma F., Chiba J., En'yo H., *et al.*, *PRL*, **98**, 152302 (2007).
8. Klein O. *Z. f. Phys.*, **37**, 895 (1926).
9. Fock V. *Z. f. Phys.*, **38**, 242 (1926).
10. Gordon W. *Z. f. Phys.*, **40**, 117 (1926).
11. Андреев А. В. *Теория частиц с полуцелым спином и сверхтонкая структура атомных уровней*. М.: Физматлит, 2003.
12. Andreev A. V. *Atomic Spectroscopy: Introduction to the Theory of Hyperfine Structure*. Springer, 2006.
13. Dirac P. A. M. *Proc. Roy. Soc. A*, **117**, 612 (1928).
14. Darwin C. G. *Proc. Roy. Soc. A*, **118**, 654; **120**, 621 (1928).
15. Gordon W. *Z. f. Phys.*, **48**, 11 (1928).
16. Klein O. *Z. f. Phys.*, **53**, 157 (1929).
17. Dombey N., Calogeracos A. *Phys. Rep.*, **315**, 41 (1999).
18. Веселаро В. Г. *УФН*, **92**, 517 (1967).
19. Cheianov V. V., Fal'ko V., Altshuler B. L. *Science*, **315**, 1252 (2007).
20. Weinberg S. *The Quantum Theory of Fields*, Vol. I, Cambridge Univ. Press, 1995;
Вайнберг С. *Квантовая теория поля*. Т. 1. М.: Физматлит, 2003.
21. Dirac P. A. M. *Nature*, **189**, 335 (1961).
22. Dirac P. A. M. *Sci. Am.*, **208**, 45 (1963).
23. Dirac P. A. M. *The Development of Quantum Theory*, Gordon, Breach, NY, 1971.
24. Rich A. *Rev. Mod. Phys.*, **53**, 127 (1981).
25. Mohr P. J. and Taylor B. N. *Rev. Mod. Phys.*, **72**, 351 (2000).
26. de Beauvoir B., Schwob C., Acef O., *et al.* *Eur. Phys. J. D*, **12**, 61 (2000).
27. Eides M. I., Grotch H. and Shelyuto V. A. *Phys. Rep.*, **342**, 63 (2001).
28. Bauch A. and Telle H. R. *Rep. Prog. Phys.*, **65**, 789 (2002).
29. Kinoshita T. *Rep. Prog. Phys.*, **59**, 1459 (1996).
30. Flowers J. L., and Petley B. W. *Rep. Prog. Phys.*, **64**, 1191 (2001).
31. Шифф Л. *Квантовая механика*. М.: ИИЛ, 1957;
Shiff L. I. *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Company, Inc., NY-Toronto-London, 1955.

32. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. *Квантовая электродинамика*. М.: Наука, 1969.
33. Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. *Введение в теорию квантованных полей*. М.: Наука, 1973.
34. Андреев А. В. *Опт. спектр.*, **96**, 645 (2004).
35. Andreev A. V. *Las. Phys. Lett.*, **1**, 69 (2004).
36. Андреев А. В. *Изв. РАН. Сер. физич.*, **69**, 1082 (2005).
37. Andreev A. V. *Las. Phys.*, **15**, 728 (2005).
38. Andreev A. V. *Las. Phys.*, **13**, 1536 (2003).
39. Andreev A. V. *Proc. SPIE*, **4748**, 20 (2002).
40. Andreev A. V. *Phys. Lett. A*, **372**, 3841 (2008).
41. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика*. М.: Физматлит, 2004.
42. Бете Г., Солпитер Э. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*. М.: ГИФМЛ, 1960;
Bethe H. A. and Salpeter E. E. *Quantum mechanics of one- and two- electron atoms*, Springer-Verlag, Berlin–Gottingen–Heidelberg, 1957.
43. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. *Квантовая электродинамика*. М.: Физматлит, 2006.
44. Lamb W. E., Retherford R. C. *Phys. Rev.*, **72**, 241 (1947).
45. Игнатович В. К. *Нейтронная оптика*. М.: Физматлит, 2006.
46. Parcell E. M. and Ramsey N. F. *Phys. Rev.*, **78**, 807 (1950).
47. Khriplovich I. B., Lamoreaux S. K. *CP violation without strangeness*, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg–NY, 1977.
48. Ramsey N. F. *Phys. Rep.*, **43**, 410 (1978).
49. Commins E. D. *CP violation in atomic and nuclear physics*. In: *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, v. 40, Academic Press, (1999).
50. Александров Ю. А. *Фундаментальные свойства нейтрона*. М.: Энергоатомиздат, 1992.
51. Dehmelt H. Experiments with rest isolated subatomic particle, *Nobel lectures in Physics — 1989*, The Nobel Foundation, 1990.
52. Brown L. S. and Gabrielse G. *Rev. Mod. Phys.*, **58**, 233 (1986).
53. Van Dyck R. S., Jr., Schwinberg P. B., and Dehmelt H. G. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 26 (1987).
54. Van Dyck R. S., Jr., Schwinberg P. B., and Dehmelt H. G., in *The Electron*, edited by D.Hestenes and A.Weingartshofer, pp. 239, Kluwer Academic, Netherlands, 1991.
55. Van Dyck R. S., Jr., Moore F. L., Farnham D. L., and Schwinberg P. B. *Bull. Am. Phys. Soc.*, **31**, 244 (1986).
56. Farnham D. L., Van Dyck R. S., Jr., and Schwinberg P. B. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 3598 (1995).
57. Beyer H. F., Kluge H.-J., and Shevelko V. P. *X-Ray radiation of highly charged ions*, Springer Series on Atoms and Plasmas, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg–NY, 1997.
58. Андреев А. В. *ЖЭТФ*, **116**, 793 (1999).
59. Воксовский С. В, Свирский М. С. *УФИ*, **163**, 115 (1993).

Предметный указатель

- π -мезонный атом 174
 - K -захват 228
 - — правила отбора 229
 - — скорость процесса 231
 - отрицательно частотный спектр
 - — собственные значения 181
 - — собственные волновые функции 184
 - отрицательный угловой момент 196
 - положительно частотный спектр
 - — потенциал ионизации 178
 - — радиус орбит 178
 - — собственные волновые функции 177
 - — собственные значения 175
 - тонкая структура спектра 178
 - эффективный угловой момент 179
- Античастица** 305
- Билинейные комбинации** 293, 360, 381, 403
- Биспинор 84, 259
- Вероятность**
 - в нерелятивистской теории 30, 95
 - в релятивистской теории 30, 96
 - заселения уровня 113
 - отрицательная 111
- Взаимодействие**
 - магнитодипольное 218
 - орбитальных магнитных моментов 246
 - электродипольное 217
- Волновая функция 25
 - биспинорная 84
 - дираковски сопряженная 89, 260
 - норма 27, 293, 356, 360, 381, 403
 - сопряженная 29
 - спинорная 58
- Вращений преобразование
 - нерелятивистская теория
 - — скалярное поле 45
 - — спинорное поле 60, 65
 - релятивистская теория
 - — скалярное поле 75
 - — спинорное поле 87
- Внутренняя четность 618
- Действие** 29, 32
 - нерелятивистская теория
 - — скалярное поле 51
 - — спинорное поле 61
 - релятивистская теория
 - — скалярное поле 81
 - — спинорное поле 89
- Диамagnetизм и парамагнетизм свободных электронов 458
- Длина**
 - дифракционная 127
 - компрессии 128
- Закон**
 - изменения числа частиц 113, 213, 270
 - сохранения заряда 113, 171, 355
 - сохранения и изменения энергии
 - — скалярное поле 108
 - — спинорное поле 276

- Зарядово-сопряженная частица 109
 Зарядовое сопряжение
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 57
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 138
 — — спинорное поле 302
 Зеркальная частица 131
 — скалярная 155, 167
 — спинорная 344
 Зоны состояний 121
- Изменение массы**
 — в кулоновском поле 190, 491, 499
 — магнитном поле 376, 455
 — гидродинамическое рассмотрение 252
- Каноническая подстановка** 53
 Квантово-механическое среднее
 — нерелятивистская теория 26
 — релятивистская теория 118
 Квантовые числа 99, 290, 291, 294, 324
 Квартионы 323
 — нейтральные (безмассовые) 324, 468
 — отрицательные 325, 463
 — положительные 325, 463
 Киральность 497
- Лагранжев формализм** 22
 Лоренца калибровка 53
 Лэмбовский сдвиг 477, 480, 481
 — механизм 478
- Магнитной поляризации вектор**
 — собственный 264, 275, 279, 358
 — трансляционная часть 216, 505, 513
 Магнитный момент
 — в нерелятивистской теории 60
 — орбитального движения 248
 — собственный 264
- Матрицы**
 — Паули 59
 — γ_μ 85
 — — стандартное представление 85
 — — спинорное представление 321
- Норма волновой функции** 27, 293, 356, 360, 381, 403
- Обращение времени**
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 56
 — — спинорное поле 60
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 135, 136, 196, 197
 — — спинорное поле 298, 299
- Оператор** 26, 114
 — импульса 43
 — квантово-механическое среднее скалярное поле 118, 284
 — обобщенного углового момента 215, 219
 — пространственно-временных вращений
 — — скалярное поле 76, 86, 215, 219
 — — спинорное поле 87
 — самосопряженный 26
 — спина
 — — в нерелятивистской теории 60
 — — в релятивистской теории 87
 — сопряженный 26, 280
 — сохраняющейся величины 118, 283
 — углового момента 46, 76, 86, 215
- Отрицательная вероятность** 111
Отрицательный угловой момент 196, 493
 — преобразование зеркальной симметрии 494

- Плотности потока 4-вектор**
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 26
 — — спинорное поле 62
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 93
 — — спинорное поле 263
- Плотности тока 4-вектор**
 — в теории Дирака 263
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 28
 — — спинорное поле 62
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 81, 97
 — — спинорное поле 261, 263
- Плотность потока энергии**
 — скалярное поле 108
 — спинорное поле 276
- Плотность энергии электромагнитного поля 102**
- Поляризация**
 — нейтральных частиц магнитным полем 382
 — нейтральных частиц электрическим полем 393
 — заряженных частиц электрическим полем 353
- Преобразования**
 — Галилея 39
 — зеркальной симметрии 494
 — Лоренца 72, 75
- Принцип наименьшего действия 31**
- Пространственная инверсия**
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 54
 — — спинорное поле 66
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 135, 136, 196, 197
 — — спинорное поле 298, 299
- Скорость**
 — групповая 124, 127
 — — зеркальной частицы 154
 — фазовая 119, 127
- Скрытый сектор пространства 167**
- Спинор 58**
- Спиральность 290, 295**
- Темная материя 131, 167**
- Теорема Пойнтинга**
 — скалярное поле 103
 — спинорное поле 272
- Уравнение**
 — Дирака 262
 — — квадрированное 262
 — для амплитуд населенности
 — — скалярное поле 101
 — — спинорное поле 511
 — кварионное 259
 — Клейна–Гордона–Фока 79, 81, 92
 — Лагранжа–Эйлера 35
 — Паули 61
 — Шредингера 51, 53
- Условие нормировки**
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 26
 — — спинорное поле 28
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 268
 — — спинорное поле 271
- Функция Гамильтона 33**
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 52
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 80, 82, 101
 — — спинорное поле 271
- Функция Лагранжа 32, 34**
 — нерелятивистская теория
 — — скалярное поле 50
 — — спинорное поле 61
 — релятивистская теория
 — — скалярное поле 79
 — — спинорное поле 89

-
- свободного электромагнитного поля 52
 - Черная дыра** 157, 167
 - Электрической поляризации вектор**
 - собственный 264, 275, 279, 358
 - трансляционная часть 216, 505, 513
 - Энергия**
 - обменная 109, 241
 - скалярной частицы в стационарном состоянии 83, 104, 105
 - скалярной частицы во внешнем поле 82, 105
 - электромагнитного и
 - — скалярного материального поля 108
 - — спинорного материального поля 276

АНДРЕЕВ Анатолий Васильевич

**РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
ЧАСТИЦЫ И ЗЕРКАЛЬНЫЕ ЧАСТИЦЫ**

Редактор *Н.Б. Бартошевич-Жагель*
Оригинал-макет: *Д.П. Вакуленко*
Оформление переплета: *Н.В. Гришина*

Подписано в печать 06.04.09. Формат 60×90/16. Бумага офсетная.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 39,25. Уч.-изд. л. 40. Тираж 400 экз.
Заказ №

Издательская фирма «Физико-математическая литература»
МАИК «Наука/Интерпериодика»
117997, Москва, ул. Профсоюзная, 90
E-mail: fizmat@maik.ru, fmlsale@maik.ru;
<http://www.fml.ru>

Отпечатано с готовых диапозитивов
в ППП «Типография «Наука»
121099, г. Москва, Шубинский пер., 6

ISBN 978-5-9221-1076-1



9 785922 110761