

Р. Фейнман, А. Хибс

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И ИНТЕГРАЛЫ ПО ТРАЕКТОРИЯМ

Оригинальный курс квантовой механики, написанный на основе лекций известного американского физика, лауреата Нобелевской премии Р. Н. Фейнмана. От всех существующих изложений данная книга отличается как исходными посылками, так и математическим аппаратом: в качестве отправного пункта принимается не уравнение Шредингера для волновой функции, а представление о бесконечномерном интегрировании по траекториям. Это позволяет наглядным и естественным образом связать квантовое и классическое описание движения. Формализм новой теории подробно развит и проиллюстрирован на примере ряда традиционных квантовых задач (гармонический осциллятор, движение частицы в электромагнитном поле и др.).

Книга представляет интерес для широкого круга физиков — научных работников, инженеров, лекторов, преподавателей, аспирантов. Она может служить дополнительным пособием по курсу квантовой механики для студентов физических специальностей.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода	5	Глава 3. Дальнейшее развитие	54
Предисловие	11	идей на конкретных примерах	
Глава 1. Основные идеи	13	§ 1. Свободная частица	54
квантовой механики		§ 2. Дифракция при	58
§ 1. Вероятность в квантовой	13	прохождении через щель	
механике		§ 3. Результаты в случае щели с	68
§ 2. Принцип неопределенности	21	резкими краями	
§ 3. Интерферирующие	25	§ 4. Волновая функция	70
альтернативы		§ 5. Интегралы Гаусса	71
§ 4. Краткий обзор понятий,	31	§ 6. Движение в потенциальном	76
связанных с вероятностью		поле	
§ 5. Над чем еще следует	34	§ 7. Системы с многими	79
подумать		переменными	
§ 6. Цель этой книги	36	§ 8. Системы с разделяющимися	80
Глава 2. Квантовомеханический	38	переменными	
закон движения		§ 9. Интеграл по траекториям как	82
§ 1. Действие в классической	38	функционал	
механике		§ 10. Взаимодействие частицы с	84
§ 2. Квантовомеханическая	41	гармоническим осциллятором	
амплитуда вероятности		§ 11. Вычисление интегралов по	86
§ 3. Классический предел	42	траекториям с помощью рядов	
§ 4. Сумма по траекториям	44	Фурье	
§ 5. Последовательные события	49	Глава 4. Шредингеровское	89
§ 6. Некоторые замечания	52	описание квантовой механики	
		§ 1. Уравнение Шредингера	90

§ 2. Гамильтониан, не зависящий от времени	98	Глава 8. Гармонические осцилляторы	216
§ 3. Нормировка волновых функций свободной частицы	103	§ 1. Простой гармонический осциллятор	217
Глава 5. Измерения и операторы	111	§ 2. Многоатомная молекула	221
§ 1. Импульсное представление	111	§ 3. Нормальные координаты	227
§ 2. Измерение квантовомеханических величин	122	§ 4. Одномерный кристалл	231
§ 3. Операторы	129	§ 5. Приближение непрерывной среды	237
Глава 6. Метод теории возмущений в квантовой механике	135	§ 6. Квантовомеханическое рассмотрение цепочки атомов	241
§ 1. Ряд теории возмущений	135	§ 7. Трехмерный кристалл	243
§ 2. Интегральное уравнение для ядра K_v	142	§ 8. Квантовая теория поля	249
§ 3. Разложение волновой функции	144	§ 9. Гармонический осциллятор, на который действует внешняя сила	252
§ 4. Рассеяние электрона на атоме	145	Глава 9. Квантовая электродинамика	256
§ 5. Возмущения, зависящие от времени, и амплитуды переходов	160	§ 1. Классическая электродинамика	257
Глава 7. Матричные элементы перехода	181	§ 2. Квантовая механика поля излучения	263
§ 1. Определение матричных элементов перехода	181	§ 3. Основное состояние	265
§ 2. Функциональные производные	188	§ 4. Взаимодействие поля с веществом	268
§ 3. Матричные элементы перехода для некоторых специальных функционалов	192	§ 5. Электрон в поле излучения	275
§ 4. Общие соотношения для квадратичной функции действия	200	§ 6. Лэмбовский сдвиг	278
§ 5. Матричные элементы перехода и операторные обозначения	203	§ 7. Излучение света	283
§ 6. Разложение по возмущениям для векторного потенциала	208	§ 8. Краткие выводы	285
§ 7. Гамильтониан	211	Глава 10. Статистическая механика	289
		§ 1. Функция распределения	290
		§ 2. Вычисление с помощью интеграла по траекториям	294
		§ 3. Квантовомеханические эффекты	300
		§ 4. Системы с несколькими переменными	308
		§ 5. О формулировке основных законов теории	317

Глава 11. Вариационный метод	321	§ 3. Шумы	346
§ 1. Принцип минимума	321	§ 4. Гауссовы шумы	351
§ 2. Применение вариационного метода	325	§ 3. Спектр шума	354
§ 3. Стандартный вариационный принцип	329	§ 6. Броуновское движение	356
§ 4. Медленные электроны в ионном кристалле	332	§ 7. Квантовая механика	360
	341	§ 8. Функционалы влияния	364
Глава 12. Другие задачи теории вероятностей		§ 9. Функционал влияния гармонического осциллятора	372
§ 1. Случайные события	341	§ 10. Заключение	376
§ 2. Характеристические функции	343		378
		Приложение. Часто применяемые интегралы	
		Литература	379

Оригинальный курс квантовой механики, написанный на основе лекций известного американского физика, лауреата Нобелевской премии Р. П. Фейнмана. От всех существующих изложений данная книга отличается как исходными посылками, так и математическим аппаратом: в качестве отправного пункта принимается не уравнение Шредингера для волновой функции, а представление о бесконечномерном интегрировании по траекториям. Это позволяет наглядным и естественным образом связать квантовое и классическое описания движения. Формализм новой теории подробно развит и проиллюстрирован на примере ряда традиционных квантовых задач (гармонический осциллятор, движение частицы в электромагнитном поле и др.).

Книга представляет интерес для широкого круга физиков — научных работников, инженеров, лекторов, преподавателей, аспирантов. Она может служить дополнительным пособием по курсу квантовой механики для студентов физических специальностей.

В распоряжении советского читателя имеется сейчас не менее десятка хороших и обстоятельных изложений основ квантовой механики (см., например, [1—7] и др.). Поэтому, казалось бы, нет необходимости в переводе и издании еще одной книги на эту тему. Однако предлагаемый вниманию читателя курс квантовой механики Фейнмана и Хибса совершенно не похож на ранее изданные труды других авторов.

Независимо от того, какой точки зрения придерживается тот или иной автор в интерпретации квантовой механики: стоит ли он на позициях копенгагенской школы, придерживается теории ансамблей или же предпочитает какую-то другую точку зрения, — в основу изложения всегда кладется понятие волновой функции. Такой подход является традиционным, но далеко не наилучшим: резкий переход от привычной картины классических траекторий к описанию, в котором точечная частица в каждый момент времени характеризуется целой функцией и с определенной вероятностью может быть обнаружена в любой пространственной точке, как правило, вызывает затруднения в понимании. Часто у студента еще довольно долгое время остается подозрение, что квантовая механика — это лишь некоторое искусственное построение, временная замена более глубокой теории, в которой удастся снова вернуться к, казалось бы, естественной картине, когда частица в каждый момент времени занимает вполне определенное положение и имеет вполне определенную скорость.

Даже беглый просмотр огромного потока писем с проектами различных новых теорий, поступающих в научно-исследовательские организации, показывает, что значительная их часть имеет в своей основе именно такое подозрение, превратившееся в настойчивую уверенность автора.

В изложении Фейнмана и Хибса квантовая картина возникает как естественное обобщение классических пространственно-временных траекторий, каждая из которых дает свой вполне определенный вклад в общую вероятность перехода частицы из точки A в точку B . При некоторых условиях фазовые множители, определяющие относительные веса отдельных траекторий, могут почти полностью компенсировать друг друга и нескомпенсированным останется вклад всего лишь одной траектории; этот частный

случай и соответствует обычному классическому движению частицы.

В таком подходе устраняется интуитивная пропасть между классической и квантовой картиной движения, хотя с принципиальной точки зрения квантовая механика в формулировке Фейнмана является, конечно, самой «обычной» и в этом смысле ничем не отличается от квантовой механики, изложенной в цитированных выше учебниках. На каждом этапе вычислений можно перейти от формулировки Фейнмана к обычным выражениям, содержащим волновую функцию.

Иногда можно слышать, что Фейнман показал полную применимость понятия траектории в квантовой механике и тем самым ограничил область действия принципа неопределенностей $\Delta p \Delta x \sim \hbar$. Следует подчеркнуть, что подобные высказывания являются принципиально неверными: никаких дополнительных ограничений на область действия принципа неопределенностей формулировка Фейнмана не вносит; довольно безразлично, утверждаем ли мы, что траектория частицы в квантовой механике в общем случае не имеет смысла (поскольку движению частицы присуще распределение импульса в интервале $\Delta p \sim \hbar/\Delta x$), или же говорим, что частица не имеет определенного значения импульса, поскольку волновые законы не позволяют локализовать ее траекторию с точностью, лучшей чем $\Delta x \sim \hbar/\Delta p$. В обоих случаях речь идет о том, что движение частицы нельзя одновременно характеризовать точными значениями ее координаты и импульса.

Остается, конечно, важный вопрос: является ли вероятностная интерпретация квантовой механики единственно возможной. Независимо от будущего ответа выяснение этой проблемы требует какого-то обобщения с выходом за рамки современной квантовой теории. Обобщения такого рода в настоящее время еще не существует. Несмотря на то что современная теория элементарных частиц находится в весьма неудовлетворительном состоянии, нам пока не известно ни одного экспериментального факта, который был бы совершенно непонятен с точки зрения современных физических представлений, подобно тому как это было с опытом Майкельсона или с излучением черного тела на рубеже XIX и XX веков. Это обстоятельство является совершенно поразительным. Может быть, дело здесь в том, что наши представления о свойствах субатомных явлений во многих случаях имеют пока скорее качественный, чем количественный характер.

Недавние эксперименты по проверке дисперсионных соотношений для упругого рассеяния пионов на протонах показали, что в пределах точности измерений современной экспериментальной техники нет никаких отклонений от известных нам кванто-

вых законов по крайней мере до расстояний $\Delta x \sim 5 \cdot 10^{-15}$ см и интервалов времени $\Delta t \sim 2 \cdot 10^{-25}$ сек.

Вполне возможно, что в будущем нам придется существенно изменить известные сейчас законы квантования; однако представляется очень маловероятным, чтобы это изменение было связано с отказом от вероятностного описания микроявлений. Наоборот, есть все основания ожидать, что в изучении микромира по мере перехода ко все меньшим масштабам расстояний и времени роль вероятностного элемента будет возрастать.

Формулировка квантовой теории, предложенная Фейнманом, потребовала довольно сложного математического аппарата бесконечномерных интегралов в функциональном пространстве. В математической литературе такие интегралы часто называют «континуальными интегралами» или «интегралами по мере Винера», однако среди физиков более распространенными являются термины «интеграл по путям» или «интеграл по траекториям». Последний из них довольно точно соответствует английскому названию книги Фейнмана и Хибса (Quantum Mechanics and Path Integrals) и сути предложенного Фейнманом метода; этим термином мы и будем пользоваться далее.

Впервые интеграл по траекториям был введен в работах Эйнштейна и Смолюховского по теории броуновского движения, где было показано, что для броуновской частицы вероятность пройти вдоль траектории $x = x(t)$ таким образом, чтобы

$$x(0) = 0,$$

$$a_1 < x(t_1) < b_1,$$

• • • • •

$$a_n < x(t_n) < b_n,$$

где

$$0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n,$$

равна

$$\int_{\mathbf{a}_1}^{b_1} \dots \int_{a_n}^{b_n} \mathcal{P}(0|x_1; t_1) \mathcal{P}(x_1|x_2; t_2-t_1) \dots$$

$$\dots \mathcal{P}(x_{n-1}|x_n; t_n-t_{n-1}) dx_1 \dots dx_n,$$

где

$$\mathcal{P}(x|y; t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-(y-x)^2/4Dt},$$

D — постоянный коэффициент диффузии. В пределе, когда все интервалы $(t_k - t_{k-1}) \rightarrow 0$, это выражение переходит в бесконечномерный интеграл по траекториям.

С математической точки зрения обоснование такого предельного перехода требует прежде всего строгого определения дифференциального элемента объема $\mathcal{D}^n x$ — меры в соответствующем функциональном пространстве. Эта задача была подробно рассмотрена в начале двадцатых годов Винером [8, 9], который показал, что в случае независимых смещений броуновской частицы $y_k \equiv x(t_k) - x(t_{k-1})$ мера

$$\mathcal{D}^n x = \frac{\exp \left[- \sum_{k=1}^n y_k^2 / 4D (t_k - t_{k-1}) \right]}{\prod_{k=1}^n \sqrt{4\pi D (t_k - t_{k-1})}} \prod_{k=1}^n dx_k.$$

Это выражение принято называть мерой Винера (более строгий вывод $\mathcal{D}^n x$ дан в монографии Каца [10]).

Интеграл по траекториям от функционала $F[x(t)]$ записывается в виде

$$\int F[x(t)] \mathcal{D}^n x = \lim \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_n}^{b_n} F(y_1; y_2; \dots y_n) \mathcal{D}^n x.$$

Интегралу Эйнштейна — Смолуховского соответствует функционал F , тождественно равный единице. Фейнмановский интеграл по траекториям отличается лишь тем, что фактор (-1) в экспоненте выражения $\mathcal{D}^n x$ заменяется мнимой единицей i , а постоянной D придается другой физический смысл.

В книге Фейнмана и Хибса не дано строгого определения интеграла по траекториям; он вводится чисто интуитивно как предел соответствующего многократного интеграла (заметим, что введение комплексной единицы существенно усложняет строгое обоснование такого предельного перехода). Впрочем, для физика это в большинстве случаев не очень важно; ему нужна лишь уверенность, что строгое доказательство может быть получено.

Как отмечают сами авторы, их книга является не законченным учебником квантовой механики, а скорее введением в этот важнейший раздел современной физики; в качестве учебника ее можно использовать совместно с каким-либо другим пособием, где подробно рассмотрены уравнение Шредингера и применение аппарата квантовой механики к решению конкретных физических задач (например, из курсов [1—7]).

Книга, несомненно, окажется полезной и интересной как для специалистов, которые уже владеют методами квантовой теории и желают расширить свой теоретический кругозор взгля-

нужно на знакомые вещи с несколько другой стороны, так и для аспирантов и студентов, изучающих квантовую механику.

Перевод выполнен Э. М. Барлитом (предисловие, гл. с 1 по 4 и с 10 по 12) и Ю. Л. Обуховым (гл. с 5 по 9).

В. С. Барашенков

Л и т е р а т у р а

1. Б л о х и н ц е в Д. И., Основы квантовой механики, М., 1958.
2. Б л о х и н ц е в Д. И. Принципиальные вопросы квантовой механики, М., 1966.
3. Д а в ы д о в А. С., Квантовая механика, М., 1963.
4. Д и р а к П. А. М., Принципы квантовой механики, М., 1960.
5. Л а н д а у Л., Л и ф ш и ц Е., Квантовая механика, М., 1963.
6. С о к о л о в А. А., Л о с к у т о в Ю. М., Т е р н о в И. М., Квантовая механика, М., 1962.
7. Ш и ф ф Л., Квантовая механика, ИЛ, 1957.
8. W i e n e r N., Journ. of Mathem. and Physics, Massachusetts Institute of Technology, 2, 131 (1923).
9. W i e n e r N., Proc. London Math. Soc. (Ser. 2), 2, 454 (1924).
10. К а ц М., Вероятность и смежные вопросы в физике, изд-во «Мир», 1965.

В основу своего нового подхода к квантовой механике Р. Фейнман положил интеграл по траекториям. Основные физические и математические идеи такого подхода впервые возникли у него во время прохождения аспирантуры в Принстоне, хотя в законченном виде, подобном изложению в настоящей книге, они не были сформулированы еще несколько лет. Эти ранние исследования были вызваны проблемой расходимости собственной энергии электрона. В ходе работы возникла идея некоторого «принципа наименьшего действия», с помощью которого удалось справиться с расходимостями, возникающими в классической электродинамике.

Затем появилась мысль применить этот принцип к квантовой механике, чтобы получить классическую механику как предельный случай квантовой при $\hbar$, стремящейся к нулю.

Фейнман в это время пытался как-нибудь связать квантовомеханическое описание явлений с такими классическими понятиями, как лагранжиан или гамильтонова функция действия — первообразная от лагранжиана. Из бесед с одним европейским физиком, гостившим в то время в США, он узнал о статье Дирака ¹⁾, где рассматривалось преобразование квантовомеханической волновой функции с помощью экспоненты от лагранжиана, помноженного на $i\epsilon$. Дирак предполагал, что это преобразование аналогично переходу от значения волновой функции в некоторый момент к ее значению в другой момент, отделенный интервалом ϵ , причем такой переход совершается простым умножением на упомянутую экспоненту.

Возник вопрос: что подразумевал Дирак под словом «аналогично»? Фейнман решил выяснить, не означает ли оно «равняется». Краткое исследование показало, что эту экспоненту действительно можно использовать именно таким образом.

Последующий анализ привел к применению экспоненты от S (в этой книге S — интеграл по времени от лагранжиана — будет называться *действием*) в качестве функции преобразования для конечных интервалов времени. Однако при использовании такой формулы необходимо для каждого момента времени вычислять интегралы по всем пространственным переменным.

Когда готовилась статья, излагающая эту идею [1], возникло представление об «интеграле по всем траекториям» как методе описания и как способе выполнения необходимых интеграций по всем координатам. К тому времени было уже разработано несколько математических приемов с применением интегрирования по

¹⁾ Подробно об истории возникновения этих идей Фейнман рассказывает в своей Нобелевской лекции [УФН, 91, вып. 1, 29 (1967)]. — Прим. перев

траекториям и рассмотрено несколько приложений, хотя главным направлением работы являлась в то время квантовая электродинамика. Фактически интегрирование по траекториям ни тогда, ни впоследствии не стало удовлетворительным способом устранения расходимостей квантовой электродинамики; зато выяснилось, что этот метод чрезвычайно полезен для решения задач в другой области. В частности, с его помощью законы квантовой электродинамики выражаются в таком виде, что их релятивистская инвариантность становится очевидной. Кроме того, были найдены успешные приложения этого метода и к другим квантовомеханическим задачам.

Из ранних применений метода интегрирования по траекториям к неподдававшейся квантовой задаче наиболее впечатляющим было его приложение к проблеме лэмбовского сдвига вскоре после его открытия. В теории при объяснении этого сдвига без привлечения явно искусственных приемов устранения расходимостей возникли трудности. Интегрирование по траекториям оказалось одним из вполне логичных и внутренне согласованных способов обращения с этими трудно преодолимыми бесконечностями.

На протяжении нескольких лет изложение квантовой механики с использованием интеграла по траекториям применялось в качестве лекционного курса в Калифорнийском технологическом институте. В течение этого времени А. Хибс, студент Фейнмана, подготовлял конспекты, пригодные для превращения курса лекций, посвященного такому подходу к квантовой механике, в книгу на эту тему.

В последующие годы, пока писалась книга, и в лекции д-ра Фейнмана и в книгу были включены новые разделы, например статистическая механика и вариационный принцип. За это же время изложение квантовой механики в лекциях Фейнмана до некоторой степени отклонилось от первоначального подхода. Выяснилось, что для решения более общих задач квантовой механики операторный метод оказывается и глубже, и намного мощнее. Тем не менее интеграл по траекториям обеспечивает наглядность восприятия квантовомеханических ситуаций, что чрезвычайно ценно при выработке интуитивного понимания квантовых законов. Благодаря этому в тех разделах квантовой механики, где данный подход оказывается особенно полезным (а большинство из них представлено в этой книге), студенту-физику обеспечено превосходное понимание основных квантовых принципов, что позволит ему в будущем намного эффективнее решать задачи из более широких областей теоретической физики.

*Р. Фейнман
А. Хибс*

ОСНОВНЫЕ ИДЕИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 1. Вероятность в квантовой механике¹⁾

В первые десятилетия нашего века экспериментальная физика накопила внушительное количество странных результатов, не укладывавшихся в прежние (классические) представления. Попытки теоретически объяснить новые явления привели сначала к замешательству, поскольку оказалось, что свет и электроны иногда ведут себя как волны, а иногда — как частицы. Кажущаяся несовместимость этих свойств была полностью устранена в 1926—1927 гг. в теории, названной квантовой механикой. Новая теория утверждала, что существуют эксперименты, точный результат которых в принципе не может быть предсказан, и что в этих случаях следует удовлетвориться вычислением вероятностей различных возможных исходов. Но гораздо более важным оказалось открытие того, что сложение вероятностей в природе происходит *не* по законам классической теории Лапласа. Квантовомеханические законы физического мира становятся очень близкими к законам Лапласа лишь по мере того, как увеличивается размер объектов, участвующих в эксперименте. Поэтому обычная теория вероятности вполне подходит для анализа поведения колеса рулетки, но не для рассмотрения отдельного электрона или фотона.

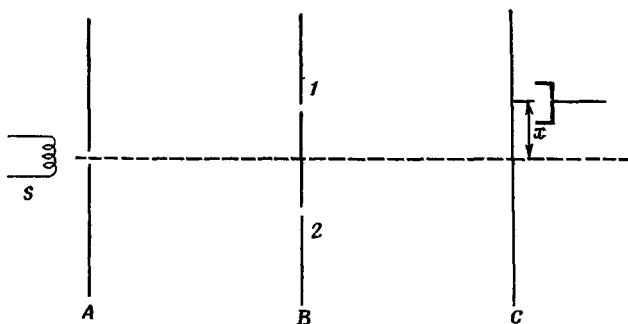
Мысленный эксперимент. Само понятие вероятности в квантовой механике не изменяется. Когда мы говорим, что вероятность определенного исхода опыта есть p , то вкладываем в это обычный смысл: при многократном повторении эксперимента ожидается, что относительное число опытов с интересующим нас исходом составит приблизительно p . Мы не будем вникать в подробности этого определения; никаких изменений понятия вероятности, принятого в классической статистике, нам не потребуется.

Зато придется радикально изменить способ вычисления вероятностей. Последствия этого изменения оказываются наиболее значительными, когда мы имеем дело с объектами атомных размеров; поэтому будем иллюстрировать законы квантовой механики описанием результатов мысленных экспериментов с отдельным электроном.

¹⁾ Большая часть материала этой главы первоначально представляла собой лекцию д-ра Фейнмана и была опубликована под названием «Концепция вероятности в квантовой механике» в [26].

Фиг. 1.1 поясняет наш воображаемый опыт. В точке A расположен источник электронов S . Все электроны вылетают из этого источника с одной и той же энергией в направлении экрана B . Этот экран имеет отверстия 1 и 2, через которые могут проходить электроны. Наконец, за экраном B в плоскости C расположен детектор электронов, который можно помещать на различных расстояниях x от центра экрана.

Если детектор очень чувствителен (например, счетчик Гейгера), то мы обнаружим, что достигающий точки x ток не непрерывен, а является как бы дождем из отдельных частиц. При малой



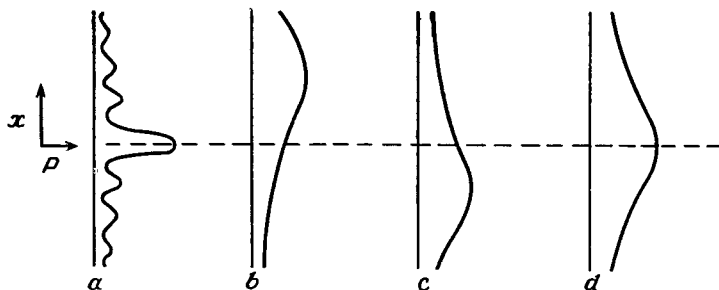
Фиг. 1.1. Схема эксперимента.

Испускаемые в точке A электроны летят в детектор, расположенный на экране C . Между A и C помещен экран B с двумя отверстиями 1 и 2. Детектор регистрирует каждый попадающий в него электрон; измеряется относительное число электронов, которые попадают в детектор, когда тот расположен на расстоянии x от экрана C , и строится кривая зависимости числа отсчетов от x , представленная на фиг. 1.2.

интенсивности источника S детектор зарегистрирует импульсы, свидетельствующие о попадании отдельных частиц, причем эти импульсы будут разделены промежутками времени, в течение которых в детектор ничего не попадает. Именно поэтому мы и считаем электроны частицами. Если бы мы расположили детекторы сразу по всему экрану, то в случае очень слабого источника S сначала сработал бы только один детектор, потом через небольшой промежуток времени появление электрона зарегистрировал бы другой детектор и т. д. При этом ни один детектор не может сработать «наполовину»: либо электрон попадает в него целиком, либо вообще ничего не происходит. Никогда не срабатывали бы и два детектора одновременно (за исключением случаев совпадения, когда за время, меньшее разрешающей способности детекторов, источник испускает два электрона — событие, вероятность которого можно уменьшить дальнейшим ослаблением интенсивности источника). Другими словами, детектор на фиг. 1.1 регистрирует некоторый одиночный корпускулярный объект, пролетающий от источника S до точки x через отверстие в экране B .

Этот опыт никогда не был поставлен именно таким образом. Некоторые эксперименты, непосредственно иллюстрирующие наши дальнейшие выводы, действительно производились, но они, как правило, оказываются значительно более сложными. Из соображений наглядности мы предпочитаем отбирать эксперименты, наиболее простые в принципиальном отношении, и не обращаем внимания на реальные трудности их выполнения.

Между прочим, в подобном опыте вместо электронов можно использовать свет; это ничего бы не изменило. Источником S мог быть источник монохроматического света, а чувствительным



Ф и г. 1.2. Результаты эксперимента.

Вероятность попадания электронов в точку x представлена как функция положения детектора x . Кривая a — результат эксперимента, изображенного на фиг. 1.1. Случай, когда открыто только отверстие 1 и электроны могут пролетать только через это отверстие, соответствует кривая b ; открытому отверстию 2 соответствует кривая c . Если предполагать, что каждый электрон проходит только сквозь одно отверстие из двух, то в случае, когда открыты оба отверстия, мы должны были бы получить кривую $d = b + c$. Это существенно отличается от кривой a , которую мы получаем в действительности.

детектором — фотоэлемент (или, еще лучше, фотоумножитель), который регистрировал бы импульсы, возникающие в нем при попадании одного фотона.

Величина, измеряемая нами при различных положениях детектора x , — это число импульсов за 1 сек. Другими словами, мы будем экспериментально определять (как функцию x) вероятность P того, что вылетевший из источника S электрон попадет в точку x .

График этой вероятности (как функции от x) представляет собой сложную кривую, которую в общих чертах передает фиг. 1.2, a . Эта кривая имеет несколько максимумов и минимумов, причем вблизи центра экрана существуют участки, куда электроны почти никогда не попадают. Объяснить, почему эта кривая имеет такой вид, и является задачей физики.

Мы могли бы сначала предположить (поскольку электроны ведут себя как частицы), что:

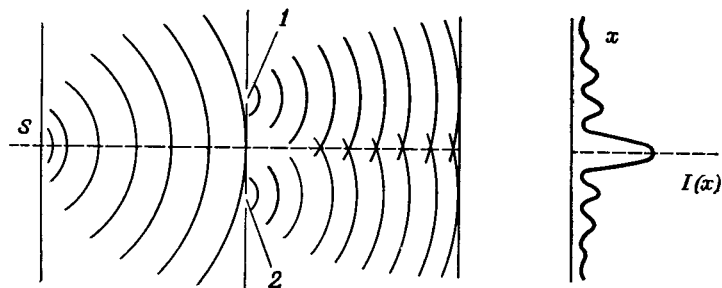
а) каждый электрон, летящий из источника S в точку x , должен проходить либо через отверстие 1, либо через отверстие 2; исходя из этого предположения, мы ожидали бы, что

б) вероятность P попадания в точку x является суммой двух слагаемых: вероятности P_1 попасть в эту точку через отверстие 1 и вероятности P_2 попасть в эту же точку через отверстие 2.

Так ли это, можно выяснить непосредственно на опыте. Каждая из слагаемых вероятностей легко определяется: просто закроем отверстие 2 и подсчитаем число попаданий в точку x , когда открыто только лишь отверстие 1. Это даст нам вероятность P_1 попадания в точку x электронов, пролетевших через отверстие 1. Результат изображается кривой b на фиг. 1.2. Аналогично, закрывая отверстие 1, найдем вероятность P_2 попадания в точку x через отверстие 2 (кривая c на фиг. 1.2).

Сумма этих вероятностей (кривая d), очевидно, не совпадает с кривой a . Следовательно, эксперимент ясно говорит нам о том, что $P \neq P_1 + P_2$, или что утверждение б) ошибочно.

Амплитуда вероятности. Вероятность попадания электрона в точку x , если открыты оба отверстия, *не равна* сумме вероятностей попадания, когда открыты только первое или только второе



Ф и г. 1.3. Аналогичный эксперимент с интерференцией волн.

Сложная кривая a на фиг. 1.2. совпадает с распределением интенсивности $I(x)$ волн, которые, выйдя из источника S и пройдя через оба отверстия, достигли бы точки x . В некоторых точках x часть волн в результате интерференции взаимопогашается (например, гребень волны, вышедшей из отверстия 1, приходит в точку x в тот же самый момент, что и впадина волны из отверстия 2); в других же точках интерференция усиливает волны. В целом на кривой интенсивности $I(x)$ возникают сложные максимумы и минимумы.

отверстие. В действительности кривая $P(x)$ нам хорошо знакома, поскольку она точно совпадает с распределением интенсивности при интерференции волн, которые, распространяясь от источника S , проходят через оба отверстия и падают на экран C (фиг. 1.3). Амплитуды волн удобнее всего изображать комплексными числами. Заметив это, мы можем сформулировать правило

для определения $P(x)$ в строгой математической форме: $P(x)$ представляет собой квадрат модуля некоторой комплексной величины $\varphi(x)$, которую мы назовем *амплитудой вероятности* попасть в точку x (если учитывается спин электрона, то это гиперкомплексная величина). Далее, $\varphi(x)$ равна сумме двух вкладов: амплитуды φ_1 попадания в точку x через отверстие 1 и амплитуды φ_2 попадания в ту же точку через отверстие 2. Другими словами,

в) существуют комплексные числа φ_1 и φ_2 , такие, что

$$P = |\varphi|^2, \quad (1.1)$$

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 \quad (1.2)$$

и

$$P_1 = |\varphi_1|^2, \quad P_2 = |\varphi_2|^2. \quad (1.3)$$

В последующих главах мы подробно рассмотрим конкретное вычисление φ_1 и φ_2 . Сейчас же мы только укажем, что, например, амплитуду φ_1 можно найти как решение волнового уравнения, описывающего распространение волн от источника S до точки 1 и из точки 1 в точку x . В этом находят свое отражение волновые свойства электронов (или фотонов в случае света).

Подведем итог: мы *вычисляем* интенсивность (т. е. квадрат модуля амплитуды) волн, которые достигли бы прибора, расположенного в точке x , а затем *интерпретируем* эту интенсивность как вероятность того, что частица попадет в точку x .

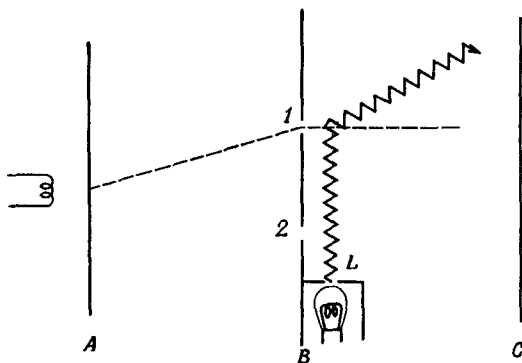
Логические затруднения. Характерно, что такое смешение понятий волны и частицы не ведет к противоречиям. Однако так будет лишь при условии, что все утверждения относительно экспериментальной ситуации делаются с большой осторожностью.

Чтобы обсудить этот вопрос более подробно, рассмотрим сначала ситуацию, которая возникает из-за того, что в общем случае равенство $P = P_1 + P_2$ несправедливо, как это подразумевает наше новое правило сложения вероятностей. Мы вынуждены признать: когда открыты оба отверстия, неправильно считать, что частица проходит только через одно или другое отверстие. В противном случае мы могли бы разбить все попадания частицы в точку x на два различных класса: попадания через отверстие 1 и попадания через отверстие 2; но тогда частота попаданий P в точку x неизбежно была бы суммой P_1 (частоты попаданий через отверстие 1) и P_2 (частоты попаданий через отверстие 2).

Чтобы избавить себя от логических затруднений, которые вносит этот пугающий вывод, можно было бы прибегнуть к разным ухищрениям. Мы могли бы предположить, например, что электрон движется каким-то весьма запутанным образом по некоей сложной траектории, проходя через отверстие 1, возвращаясь потом назад через отверстие 2 и выходя снова через отверстие 1. Или, может

быть, электрон как-то размазывается и проходит через оба отверстия по частям так, чтобы в конечном итоге получился интерференционный результат *в*). Возможно также, что вероятность P_1 была найдена неточно вследствие того, что закрытие отверстия *2* могло бы повлиять на движение вблизи отверстия *1*. Чтобы объяснить полученную картину, предлагалось много подобных классических механизмов. Однако если поставить такой же опыт с фотонами (а результат при этом будет тот же), то две интерферирующие траектории можно расположить на расстоянии многих сантиметров друг от друга, так что движения по ним почти наверняка должны быть независимы. Реальная ситуация намного сложнее, чем это можно было бы предположить вначале; это показывает следующий эксперимент.

Влияние наблюдения. Мы сделали вполне логичный вывод: поскольку $P \neq P_1 + P_2$, никак нельзя предполагать, что электрон проходит либо только через первое отверстие, либо только



Фиг. 1.4. Видоизменение эксперимента, изображенного на фиг. 1.1.

За экраном *B* мы помещаем осветитель *L* и наблюдаем рассеяние света на электронах, проходящих через отверстие *1* или через отверстие *2*. При сильном источнике света действительно оказывается, что каждый электрон проходит только через одно из двух отверстий. Однако вероятность попадания в точку *x* при этом не описывается кривой *a* на фиг. 1.2, а имеет вид кривой *d*.

через второе. Однако легко придумать опыт для прямой проверки нашего вывода. Просто мы должны поместить за отверстиями источник света и проследить, через какое отверстие пройдет электрон (фиг. 1.4). Поскольку электроны рассеивают свет и если рассеяние происходит позади отверстия *1*, то можно сделать вывод, что электрон прошел именно через это отверстие; если же свет рассеивается за отверстием *2*, то электрон прошел через него.

Результат этого эксперимента должен недвусмысленно показывать, что электрон *действительно* проходит либо через первое, либо через второе отверстие, т. е. на каждом электроне, который попадает на экран C (предполагается, что интенсивность света достаточна для того, чтобы мы не перестали видеть электрон), рассеяние света происходит либо позади отверстия 1 , либо позади отверстия 2 и никогда не происходит (если источник S очень слабый) в обоих местах сразу (более тонкий эксперимент мог бы даже показать, что заряд проходит либо только через одно отверстие, либо только через другое и что во всех случаях это полный заряд электрона, а не часть его).

А теперь возникает парадокс. Действительно, предположим, что мы объединяем два эксперимента. Будем следить, через какое отверстие проходит электрон, и в то же время определять вероятность того, что он попадет в точку x . Тогда о каждом электроне, попадавшем в точку x , мы можем сказать, основываясь на эксперименте, пришел он через отверстие 1 или через отверстие 2 . Сперва мы можем проверить, что вероятность P_1 дается кривой b . Если из всех попадающих в точку x электронов отобрать только те, которые приходят через отверстие 1 , то мы убедимся, что их распределение действительно очень близко к кривой b (этот результат получается независимо от того, открыто или закрыто отверстие 2 , и нам ясно, что это обстоятельство никак не влияет на движение вблизи отверстия 1). Если же отобрать электроны, проходившие, как мы видели, сквозь отверстие 2 , то получим кривую P_2 , очень близкую к кривой C на фиг. 1.2. Но тогда каждый электрон появляется только в одном из двух отверстий, и мы можем разделить все электроны на два различных класса. Следовательно, если объединить теперь оба эти класса, то мы *должны* получить распределение $P = P_1 + P_2$ (кривая d на фиг. 1.2) и притом получить это экспериментально. Теперь интерференционные эффекты в эксперименте почему-то не проявляются.

Что же изменилось? Когда мы следим за электронами, чтобы установить, через какое отверстие они проходят, то получаем результат $P = P_1 + P_2$. Если же не следим за ними, получаем другой результат:

$$P = |\varphi_1 + \varphi_2|^2 \neq P_1 + P_2.$$

Как видно, следя за движением электронов, мы изменили вероятность того, что они попадут в точку x . Как это могло произойти? Впрочем, для наблюдения за электронами мы использовали свет; видимо, он при столкновении с электронами изменяет их движение, или, точнее, изменяет вероятность их попадания в точку x .

Нельзя ли ослабить интенсивность света в надежде уменьшить

таким образом его воздействие? Незначительное возмущение, разумеется, не сможет вызвать конечное изменение распределения. Однако слабый свет вовсе не означает более слабого воздействия. Свет состоит из фотонов с энергией $h\nu$ и импульсом h/λ (где ν — частота и λ — длина волны). Ослабить свет — значит просто уменьшить количество фотонов, так что мы могли бы вообще перестать видеть электрон, но если мы его все же видим, то это означает, что фотон рассеялся как целое и электрону передан конечный импульс порядка h/λ .

Электроны, которые мы не видим, распределяются в соответствии с правилом интерференции a , тогда как замеченные нами и, следовательно, рассеявшие фотон попадают в точку x с вероятностью $P = P_1 + P_2$. Поэтому суммарное распределение представляет собой среднее взвешенное распределений a и d . В случае большой интенсивности света, когда рассеяние происходит почти на всех электронах, оно близко к распределению d ; в случае же очень малой интенсивности, когда лишь незначительное число электронов рассеивает свет, оно становится более похожим на распределение a .

Могло бы показаться, что, поскольку свет передает импульс h/λ , можно было бы все же попытаться ослабить этот эффект, применяя свет с большей длиной волны. Однако всему есть предел. Если длина волны очень велика, мы не сможем определить, где рассеялся свет: за отверстием 1 или за отверстием 2, поскольку источник света с длиной волны λ нельзя локализовать в пространстве с точностью, превышающей λ .

Таким образом, во избежание парадокса любое физическое вмешательство, имеющее целью определить, через какое отверстие проходит электрон, должно исказить опыт и превратить распределение a в d .

Впервые это заметил Гейзенберг; он сформулировал свой принцип неопределенности, гласящий, что самосогласованность новой механики требует ограничения точности, с которой могут быть выполнены эксперименты. В нашем случае это означает, что любая попытка сконструировать прибор, определяющий то отверстие, через которое прошел электрон, и при этом настолько «деликатный», чтобы не вызвать нарушения интерференционной картины, обречена на неудачу. Внутренняя согласованность квантовой механики требует общности этого утверждения; оно обязано охватывать все физические средства, которые можно было бы применить для уточнения траектории электрона. Мир не может быть наполовину квантовомеханическим, наполовину классическим.

Никаких исключений из принципа неопределенности до сих пор не обнаружено.

§ 2. Принцип неопределенности

Мы сформулируем принцип неопределенности следующим образом: если в процессе выбора из альтернативных ситуаций удастся проследить более чем за одной из них, то интерференция между этими альтернативами становится невозможной. Первоначальная формулировка принципа, данная самим Гейзенбергом, отличалась от нашей, и мы несколько задержимся, чтобы обсудить исходную гейзенберговскую формулировку.

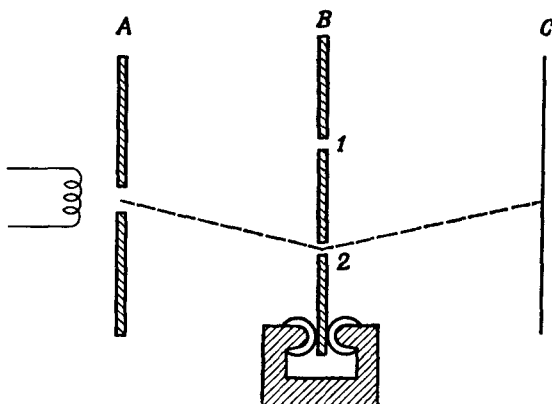
В классической физике частицу можно считать движущейся по определенной траектории и приписывать ей в каждый момент времени определенные положение и скорость. Такое описание не привело бы к тем необычным результатам, которые, как мы видели, характерны для квантовой механики. Принцип Гейзенберга ограничивает применимость подобного классического описания. Например, имеет свои пределы представление о том, что частица занимает определенное положение и обладает определенным импульсом. Реальная система (т. е. система, подчиняющаяся квантовой механике) представляет собой, если смотреть на нее с классической точки зрения, систему, в которой положение и импульс не определены. Тщательным измерением можно уменьшить неопределенность положения, а в других опытах можно было бы точнее определить импульс. Однако, как утверждает принцип Гейзенберга, нельзя точно измерить обе эти величины одновременно; в любом эксперименте произведение неопределенностей импульса и координаты не может быть меньше некоторой величины порядка $\hbar^1$). Аналогичное условие требуется и для физической согласованности ситуации, которую мы обсуждали выше. Это можно показать, рассмотрев еще одну попытку определения, через какое именно отверстие проходит электрон.

Пример. Если электрон, проходя через одно из отверстий, отклоняется, то вертикальная составляющая его импульса изменяется. Кроме того, электрон, попадающий в детектор x после прохождения отверстия 1, отклоняется на иной угол (а потому и импульс его претерпевает иное изменение), нежели электрон, попадающий в точку x через отверстие 2. Предположим, что экран B не закреплен жестко, а может свободно передвигаться вверх и вниз (фиг. 1.5). Любое изменение вертикальной составляющей импульса электрона в момент его прохождения через отверстие будет сопровождаться равным и противоположным по знаку изменением импульса экрана, которое можно найти, измеряя скорость экрана до и после прохождения электрона.

1) $\hbar = h/2\pi = 1,054 \cdot 10^{-27}$ эрг·см, где h — постоянная Планка.

Обозначим через δp разность между изменениями импульсов электронов, проходящих через отверстия 1 и 2. Тогда для однозначного выяснения того, через какое отверстие прошел электрон, требуется определить импульс экрана с точностью, превышающей δp .

Если в эксперименте импульс экрана B можно измерить с требуемой точностью, то мы тем самым определим, через какое отверстие прошел электрон, и распределение вероятностей приобретает вид кривой d на фиг. 1.2. Интерференционная картина (a), очевидно, исчезает. Как это может произойти? Чтобы понять это,

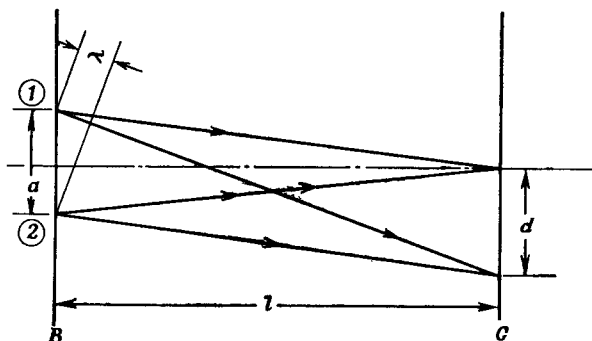


Ф и г. 1.5. Еще одна модификация эксперимента, изображенного на фиг. 1.1.

Экран B может свободно передвигаться в вертикальном направлении. Если электрон проходит отверстие 2 и попадает в детектор (например, в точке $x = 0$), то он отклонится вверх, а экран B получит отдачу вниз. Определяя, куда откатывается покоившийся вначале экран, можно установить отверстие, через которое проходит электрон. Однако, согласно принципу неопределенности Гейзенберга, такие прецизионные измерения импульса экрана B были бы несовместимы с точным знанием его вертикального положения, поэтому мы не могли бы быть уверены, что линия, соединяющая центры двух отверстий, установлена правильно. Вместо кривой a на фиг. 1.2 мы получим распределение, несколько размазанное в вертикальном направлении, похожее на кривую d фиг. 1.2.

заметим, что при построении кривой, описывающей распределение электронов в плоскости экрана C , необходимо точно знать вертикальное положение двух отверстий на экране B . Поэтому мы должны измерить не только импульс экрана B , но и его координату. Для возникновения интерференционной картины (кривая a на фиг. 1.2) положение экрана должно быть известно с точностью, превышающей $d/2$, где d — расстояние между соседними максимумами кривой. Теперь предположим, что мы не знаем вертикальное положение экрана с такой точностью; тогда положение кривой a на фиг. 1.2 нельзя определить с точностью, большей чем $d/2$, поскольку за начало отсчета вертикальной шкалы

необходимо принять некоторую фиксированную точку на экране B . При этом значение вероятности P для любого x должно отыскиваться усреднением по всем ее значениям внутри окрестности размером $d/2$ вокруг точки x ; в процессе такого усреднения интерференционная картина, очевидно, размажется и результирующая кривая не будет отличаться от кривой d на фиг. 1.2.



Фиг. 1.6. Аналогичный эксперимент со светом.

Два луча света, находящиеся в одинаковых фазах в точках 1 и 2, будут усиливать друг друга при попадании на экран C , если они проходят расстояние между экранами B и C за одинаковое время. Это означает, что максимум в дифракционной картине, возникающий при прохождении лучей света через два отверстия, будет находиться в центре экрана. Следующий максимум будет расположен ниже центра экрана настолько, чтобы достигающий этой точки луч из отверстия 1 проходил путь точно на одну длину волны больше, чем луч из отверстия 2.

Интерференция в эксперименте — признак волнового поведения электронов. Поскольку картина та же, что и в случае любого волнового движения, мы можем воспользоваться хорошо известным в теории дифракции света соотношением, которое связывает расстояние a между отверстиями, расстояние l от экрана B до плоскости C , длину волны света λ и расстояние между максимумами d :

$$\frac{a}{l} = \frac{\lambda}{d} \quad (1.4)$$

(фиг. 1.6). В гл. 3 мы покажем, что длина волны электрона неразрывно связана с его импульсом соотношением

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.5)$$

Если p — полный импульс электрона (а мы предполагаем, что все пролетающие электроны имеют одинаковый полный импульс), то из фиг. 1.7 видно, что в случае $l \gg a$

$$\frac{\delta p}{p} \approx \frac{a}{l}. \quad (1.6)$$

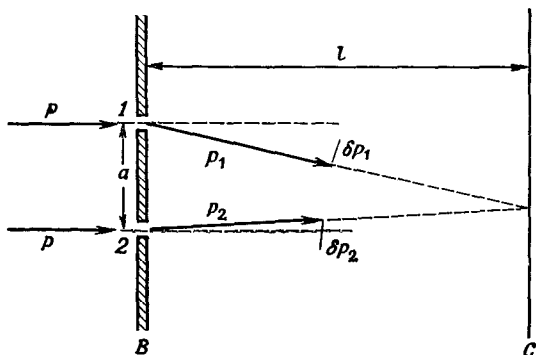
Отсюда следует, что

$$d = \frac{h}{\delta p}. \quad (1.7)$$

Поскольку из опыта мы знаем, что интерференционная картина исчезла, то неопределенность δx в измерении положения экрана B должна быть больше $d/2$. Следовательно,

$$\delta p \delta x \geq \frac{h}{2}, \quad (1.8)$$

что согласуется (по порядку величины) с обычной формулировкой принципа неопределенности.



Фиг. 1.7. Отклонение электрона при прохождении через отверстие в экране B .

Оно фактически сводится к изменению импульса δp . В направлении, приблизительно перпендикулярном исходному вектору импульса; к нему добавляется небольшая составляющая. Изменение энергии совершенно ничтожно, и при малых углах отклонения абсолютное значение полного импульса практически не меняется. Поэтому угол отклонения с высокой точностью можно положить равным $|\delta p|/|p|$. Если в одну и ту же точку на экране C попадают два электрона, один из которых вылетал из отверстия 1 с импульсом p_1 , а другой — из отверстия 2 с импульсом p_2 , то углы, на которые они отклонились, должны отличаться приблизительно на величину a/l . Поскольку мы не можем сказать, через какое отверстие прилетел электрон, неопределенность вертикальной составляющей импульса, которую он приобретает при прохождении через экран B , должна быть эквивалентна неопределенности в угле отклонения. Это дает соотношение $|p_1 - p_2|/|p| = |\delta p|/|p| = a/l$.

Подобный же анализ можно применить и к тому измерительному устройству, где использовалось рассеяние света для определения того, через какое отверстие проходит электрон; для погрешностей измерений мы получим ту же самую оценку.

Рассматривая подобные эксперименты, мы отнюдь не доказываем принцип неопределенности, а лишь иллюстрируем его. Обоснование же его двоякого рода: во-первых, никто еще не нашел какого-либо экспериментального способа устранить накладываемые им ограничения на точность измерений; во-вторых, он представляется необходимым для того, чтобы законы квантовой механики были совместны; предсказания этих законов вновь и вновь подтверждаются с большой точностью.

§ 3. Интерферирующие альтернативы¹⁾

Две разновидности альтернатив. С физической точки зрения две траектории представляют собой независимые альтернативы; однако было бы ошибкой думать, что полная вероятность в этом случае есть сумма $P_1 + P_2$. Видимо, либо посылки, либо суждения, приводящие к такому заключению, являются ложными. Поскольку инерция нашего мышления очень сильна, многие физики считают более удобным отказаться от посылки, чем от суждения. Чтобы избежать парадоксов, они принимают следующую точку зрения: если не делается попытки уточнить, через какое отверстие проходит электрон, то нельзя и говорить, что он должен пройти через одно из двух отверстий. Только в том случае, когда действует прибор, определяющий путь электрона, можно утверждать, что он действительно проходит через одно из этих отверстий. Если вы следите за электроном, то видите, где он пролетает, но если вы не наблюдаете за ним, то не можете сказать, как именно он летит. Природа требует от нас предельной логической собранности [как выразились авторы — «walk a logical tightrope». — *Ред.*], если мы желаем ее описывать.

В противоположность такой точке зрения будем следовать в этой книге предположению, сделанному в начале этой главы, и откажемся от суждения, приводящего к ложному выводу: не будем вычислять вероятности путем суммирования вероятностей всех альтернатив. Для того чтобы сделать более понятными новые правила сложения вероятностей, удобно уточнить два различных содержания термина «альтернатива». С первым из них связана концепция взаимоисключения. Так, отверстия 1 и 2 представляют собой *несовместимые альтернативы*, если одно из них закрыто или если действует прибор, который может однозначно определить, через какое отверстие прошел электрон. С другим значением связана концепция комбинирования или интерференции («интерференция» означает у нас то же самое, что и в оптике, т. е. усиление или ослабление амплитуды при наложении процессов). Таким образом, будем говорить, что по отношению к электрону отверстия 1 и 2 представляют собой *интерферирующие альтернативы*, если: 1) открыты оба отверстия и если 2) не предпринимается попыток определить, какое отверстие пропустило электрон. В случае когда подобные альтер-

¹⁾ На протяжении всей книги термин «альтернатива» применяется авторами для обозначения взаимоисключающих (альтернативных) возможностей при некотором выборе. Поскольку в советской физической литературе нет краткого и общепринятого термина для такого понятия, мы всюду сохраняем авторскую терминологию. — *Прим. ред.*

нативы имеют место, нужно изменить правила получения вероятностей и выбрать их в виде (1.1) и (1.2).

Понятие об интерференции амплитуд — основное во всей квантовой механике. В некоторых ситуациях могут присутствовать обе разновидности альтернатив. Предположим, что в эксперименте с двумя отверстиями нас интересует вероятность попадания электрона в некоторую точку, скажем, в пределах 1 см от центра экрана. Мы можем понимать под этим вероятность того, что сработавший детектор находился в пределах 1 см от точки $x = 0$ (если детекторы были размещены по всему экрану и один из них наверняка сработал бы, когда электрон попал на экран). В этом случае существуют различные вероятности того, что электрон попадает в детектор через то или другое отверстие. Отверстия представляют собой интерферирующие альтернативы, а детекторы — несовместимые. Поэтому сначала складываем $\varphi_1 + \varphi_2$ для фиксированного значения x , возводим эту сумму в квадрат, а затем полученные вероятности интегрируем по x от -1 до 1 .

Обладая небольшим опытом, нетрудно сказать, какая именно разновидность альтернативы имеет место. Предположим, например, что мы располагаем информацией об альтернативах (или ее можно было бы получить без изменения конечного результата), но эта информация не используется. Тем не менее суммирование вероятностей в этом случае нужно выполнять по правилу для несовместимых альтернатив. Благодаря имеющейся информации эти несовместимые альтернативы при необходимости могли бы быть идентифицированы по отдельности.

Некоторые иллюстрации. Альтернативы, которые невозможно различить никаким экспериментом, всегда интерферируют. Яркой иллюстрацией этого факта служит, например, рассеяние двух ядер на угол 90° в системе центра масс, которое изображено на фиг. 1.8. Пусть A является α -частицей, а B — некоторым другим ядром. Спрашивается, какова вероятность того, что A попадает в точку 1 и B в точку 2. Пусть амплитудой такого процесса будет $\varphi_{AB}(1,2)$, тогда вероятность $p = |\varphi_{AB}(1,2)|^2$. Допустим, что мы не различаем, какое ядро попадает в точку 1 (т. е. не знаем, будет ли это ядро A или B). Если это ядро B , то амплитудой такого события будет $\varphi_{AB}(2,1)$ [равная $\varphi_{AB}(1,2)$, так как мы выбрали угол рассеяния 90°]. Вероятность того, что одно ядро попадет в точку 1, а другое в точку 2, равняется

$$|\varphi_{AB}(1, 2)|^2 + |\varphi_{AB}(2, 1)|^2 = 2p. \quad (1.9)$$

Мы сложили вероятности. Случаи, когда и A , и B попадают в точку 1, представляют собой несовместимые альтернативы, так

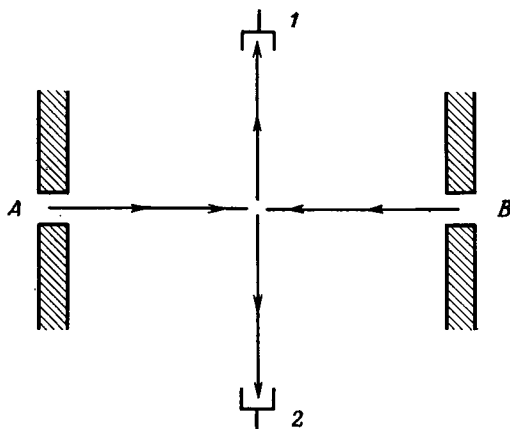
как при желании мы могли бы, не нарушая предыдущего процесса рассеяния, определить тип ядра, попавшего в точку 1.

Но что произойдет, если не только A , но и B также будет α -частицей? Никакой эксперимент в этом случае не в состоянии различить их, и если что-то попадает в точку 1, мы не сможем узнать, какая это частица. Здесь налицо интерферирующие альтернативы, и вероятность равна уже

$$|\varphi_{AB}(1, 2) + \varphi_{AB}(2, 1)|^2 = 4p. \quad (1.10)$$

Этот интересный результат проверен на опыте.

Когда происходит рассеяние электронов на электронах, то результат отличен от описанного в двух отношениях. Во-первых,



Ф и г. 1.8. Рассеяние одного ядра на другом в системе центра масс.

При рассеянии двух тождественных ядер появляется четкий интерференционный эффект. В этом случае налицо две интерферирующие альтернативы. Частица, которая попадает, например, в точку 1, могла вылететь либо из A , либо из B . Если бы исходные ядра не были идентичными, то проверка тождественности в точке 1 могла бы указать, какая альтернатива имеет место в действительности; тогда альтернативы были бы несовместимы и поэтому никаких интерференционных эффектов не возникло бы.

у электрона есть свойство, которое мы называем *спином*, и каждый электрон может находиться в одном из двух состояний: его спиновый момент направлен «вверх» или «вниз». В случае рассеяния электронов малой энергии спиновое состояние в первом приближении не изменяется. Со спином связан магнитный момент электрона; при малых скоростях основными будут электрические силы, обусловленные зарядом, а влияние магнитных сил сводится лишь к малой поправке, которой мы пренебрегаем. Поэтому если спин электрона A направлен вверх, а спин электрона B — вниз, то, определив его направление, мы могли бы затем различить их в момент прихода в точку 1. Вероятность рассеяния

в этом случае

$$|\varphi_{AB}(1, 2)|^2 + |\varphi_{AB}(2, 1)|^2 = 2p. \quad (1.11)$$

Если же и электрон A , и электрон B начинают движение, когда их спины были направлены вверх, то мы не сможем их в дальнейшем различить и следует ожидать, что

$$|\varphi_{AB}(1, 2) + \varphi_{AB}(2, 1)|^2 = 4p. \quad (1.12)$$

В действительности этот вывод ошибочен, и, как это ни странно, электроны не подчинены такому правилу. Фаза амплитуды, описывающей перемену мест пары тождественных электронов, отличается от исходной на угол 180° . Следовательно, в случае когда оба спина направлены вверх, вероятность рассеяния равна

$$|\varphi_{AB}(1, 2) - \varphi_{AB}(2, 1)|^2. \quad (1.13)$$

В случае же рассеяния на угол 90° $\varphi_{AB}(1, 2) = \varphi_{AB}(2, 1)$, так что выражение (1.13) обращается в нуль.

Фермионы и бозоны. Правило сдвига фазы на угол 180° в случае, когда альтернативы включают в себя обмен тождественными электронами, довольно необычно и его физическая природа понята еще не до конца. Кроме электронов, ему подчинены и другие частицы. Такие частицы называют фермионами и говорят, что они подчиняются статистике Ферми (антисимметричной статистике). К фермионам относятся электроны, протоны, нейтроны, нейтрино и μ -мезоны, а также комбинации из нечетного числа этих частиц, как, например, атом азота, содержащий семь электронов, семь протонов и семь нейтронов. Правило сдвига фазы на угол 180° впервые сформулировал Паули, и оно составляет квантовомеханическую основу принципа исключения Паули, определяющего характерные черты периодической системы элементов.

Частицы, перестановка которых не изменяет фазу амплитуды, называют бозонами и говорят, что они подчинены статистике Бозе, или симметричной статистике. Примерами бозонов являются фотоны, π -мезоны и системы, содержащие четное число ферми-частиц, как, например, α -частица, состоящая из двух протонов и двух нейтронов. Все частицы вещества являются либо бозонами, либо фермионами. Эти свойства симметрии могут приводить к глубоким и на первый взгляд таинственным последствиям; например, жидкий гелий, состоящий из атомов с массовым числом 4 (т. е. из бозонов), при температуре порядка $1-2^\circ \text{K}$ может течь без сопротивления по узким трубкам, в то время как жидкость, состоящая из атомов с массовым числом 3 (из фермионов), не обладает таким свойством.

Понятие тождественности частиц в квантовой механике намного полнее и определеннее, чем в классической. С точки зрения классической механики две частицы, которые считаются тождественными, могли бы быть лишь приблизительно одинаковы или настолько одинаковы, чтобы на практике с помощью современной техники эксперимента их нельзя было различить. При этом сохраняется возможность, что техника будущего установит такое различие. Однако в квантовой механике положение совершенно иное: мы можем указать прямой критерий, устанавливающий, являются ли частицы совершенно неразличимыми или они различимы.

Если в эксперименте, который схематически изображен на фиг. 1.8, частицы, вылетающие из точек A и B , одинаковы лишь приблизительно, то усовершенствование техники эксперимента дало бы нам возможность (путем тщательного изучения попадающих в точку x частиц) определить, прилетают ли они из точки A или из точки B . В этом случае альтернативы, соответствующие двум исходным положениям, должны быть несовместимы и, следовательно, их амплитуды не будут интерферировать. Важно, что подобный акт обследования имел бы место уже *после того*, как произошло рассеяние. Таким образом, наблюдение не могло повлиять на процесс рассеяния, а это в свою очередь означает, что не следует ожидать интерференции между амплитудами, описывающими эти альтернативы (вылетает ли частица, попадающая в точку I , из A или из B). В этом случае, согласно принципу неопределенности, мы должны заключить, что нет способа (даже в принципе) различить эти возможности; другими словами, если частица попадает в точку I , то с помощью любого испытания (каково бы оно ни было) ни сейчас, ни в будущем совершенно невозможно определить, вылетела частица из точки A или из точки B . В этом, более строгом, смысле все электроны (равно как все протоны и другие частицы) тождественны.

Рассмотрим теперь рассеяние нейтронов на кристалле. Когда на атомах кристалла рассеиваются нейтроны с длиной волны, несколько меньшей, чем расстояние между атомами, мы получаем ярко выраженные интерференционные эффекты. Подобно рентгеновским лучам, нейтроны вылетают из кристалла только в некоторых дискретных направлениях, определяемых брэгговским законом отражения. В этом примере интерферирующими альтернативами будут взаимоисключающие возможности рассеяния отдельного нейтрона на том или ином атоме (амплитуда рассеяния нейтрона на каком-либо атоме настолько мала, что нет надобности рассматривать альтернативы, соответствующие рассеянию более чем на одном атоме). Волны амплитуды (описывающей движение нейтрона), которые распространяются от этих

атомов, усиливают друг друга лишь в некоторых определенных направлениях.

Существует одно интересное обстоятельство, которое усложняет эту явно простую картину. Подобно электронам нейтроны имеют спин, и у них можно выделить два состояния: состояние со спином «вверх» и состояние со спином «вниз». Предположим, что атомы рассеивающего вещества обладают аналогичным спиновым свойством, как, например, углерод C^{13} . В этом случае эксперимент покажет два явно различных типа рассеяния. Оказывается, что, кроме рассеяния в дискретных направлениях, которое описано выше, имеется и диффузное рассеяние по всем направлениям. Почему оно возникает?

Ключ к пониманию этих двух типов рассеяния мы получим, заметив следующее. Предположим, что спины всех нейтронов, участвующих в эксперименте, до рассеяния направлены вверх. Если анализировать направления спинов вылетающих нейтронов, то обнаружится, что некоторые будут направлены вверх, а некоторые — вниз; нейтроны, спин которых по-прежнему направлен вверх, рассеиваются только под дискретными углами Брэгга, в то время как нейтроны, спин которых перевернулся, рассеиваются диффузно по всем направлениям.

Если нейтрон изменил направление спина, то закон сохранения углового момента потребует, чтобы ядро, на котором произошло рассеяние, также изменило направление своего спина на обратное. Следовательно, в принципе можно было бы выявить то ядро, на котором рассеялся данный нейтрон. Мы могли бы для этого запомнить перед экспериментом спиновое состояние всех рассеивающих ядер в кристалле. Затем после того, как рассеяние произошло, мы могли бы исследовать кристалл вновь и посмотреть, у каких ядер спин переменялся на обратный. Если ни у одного ядра в кристалле спин не претерпел такого изменения, то ни у одного нейтрона направление спина также не изменилось, и мы не можем сказать, на каком ядре в действительности произошло рассеяние нейтрона. В этом случае альтернативы интерферируют, и в результате мы имеем брэгговский закон рассеяния.

Если же при этом обнаружится, что у какого-то ядра направление спина изменилось, то мы знаем, что на этом именно ядре и произошло рассеяние; интерференции альтернатив нет. Движение рассеянного нейтрона описывается сферическими волнами, которые расходятся от рассеивающего ядра, и в описание входят только эти волны. В таком случае вылет нейтрона равновероятен в любом направлении.

Исследовать все атомные ядра в кристалле, чтобы найти одно, у которого изменилось спиновое состояние, — это подобно поис-

кам иголки в стоге сена; но природу не интересуют практические трудности экспериментатора. Существенно то, что в принципе возможно, не возмущая движение рассеянного нейтрона, определить, на каком именно ядре произошло рассеяние. Наличие такой возможности означает, что даже если мы и не выявляем это ядро, тем не менее имеем дело с несовместимыми (и, следовательно, не интерферирующими) альтернативами.

С другой стороны, возникновение интерференции между альтернативами, если спиновые состояния нейтронов не изменились, означает, что даже в принципе невозможно когда-либо обнаружить, на каком отдельном ядре кристалла произошло рассеяние — невозможно, во всяком случае, без вмешательства в опыт в момент рассеяния или до него.

§ 4. Краткий обзор понятий, связанных с вероятностью

Альтернативы и принцип неопределенности. В предыдущем изложении мы хотели разъяснить смысл амплитуды вероятности, ее значение в квантовой механике и рассмотреть правила обращения с вероятностями. При этом выяснилось, что существует некоторая величина, называемая *амплитудой вероятности*, сопоставляемая каждому возможному в природе способу осуществления события. Например, электрон, летящий от источника S в детектор, расположенный в точке x (см. фиг. 1.1), имеет одну амплитуду вероятности, когда он движется через отверстие 1 экрана B , и другую амплитуду, если он проходит через отверстие 2. Событию в целом можно затем сопоставить амплитуду вероятности, получаемую путем сложения амплитуд для каждого альтернативного способа движения. Так, приведенная в равенстве (1.2) полная амплитуда вероятности попадания в точку x есть

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2. \quad (1.14)$$

Квадрат модуля полной амплитуды мы интерпретируем как вероятность того, что соответствующее событие произойдет. Например, вероятность попадания электрона в детектор

$$P = |\varphi_1 + \varphi_2|^2. \quad (1.15)$$

Если мы прерываем развитие процесса еще до его завершения, наблюдая состояние частиц в ходе события, то тем самым изменяем вид выражения для полной амплитуды. Так, если установлено, что система находится в некотором определенном состоянии, то тем самым мы исключаем возможность того, чтобы она оказалась в каком-либо другом состоянии, и при вычислении полной

вероятности амплитуды, связанные с такими исключенными состояниями, уже нельзя рассматривать в качестве альтернатив. Например, если с помощью какого-нибудь устройства определить, что электрон проходит именно через отверстие I , то амплитуда его попадания в детектор будет точно равна φ_1 . Совершенно неважно, будем ли мы (в тот момент, когда работает измеряющее устройство) фактически наблюдать и записывать результат наблюдения или же нет. Очевидно, что при желании его можно было бы узнать в любое время. Уже одного вмешательства измеряющего устройства достаточно, чтобы изменить систему и соответствующую амплитуду полной вероятности.

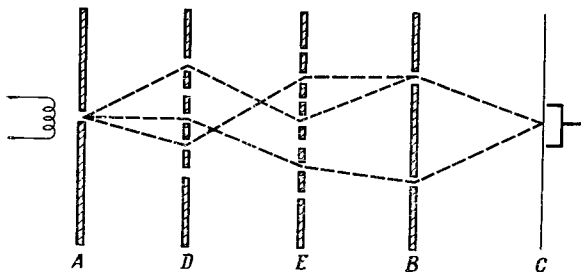
Это последнее обстоятельство и составляет основу принципа неопределенности Гейзенберга, который утверждает, что существует естественный предел точности любого эксперимента и любого усовершенствования измерений.

Структура амплитуды вероятности. Амплитуда вероятности всякого события представляет собой сумму амплитуд различных альтернативных возможностей осуществления этого события. Это позволяет изучать ее многими различными способами в зависимости от того, на какие классы можно подразделить альтернативы. Наиболее детальная картина получается при условии, что частица при переходе из состояния A в состояние B за данный промежуток времени совершает вполне определенное движение (т. е. определенным образом изменяет свои координаты в зависимости от времени), описывая конкретную траекторию в пространстве и времени. С каждым таким возможным движением мы будем связывать одну амплитуду; полная же амплитуда вероятности будет суммой вкладов от всех траекторий.

Эту мысль можно пояснить, продолжив рассмотрение нашего эксперимента с двумя отверстиями. Пусть между источником и отверстием помещена пара дополнительных экранов D и E (фиг. 19). В каждом из них проделаем по нескольку отверстий, которые обозначим $D_1, D_2, \dots$ и $E_1, E_2, \dots$. Для простоты будем предполагать, что движение электронов происходит в плоскости (x, y) . В таком случае имеется несколько альтернативных траекторий, которые может выбрать электрон при своем движении от источника к отверстию в экране B . Он мог бы направиться сначала к отверстию D_2 , далее к E_3 и затем к отверстию I или же мог бы, выйдя из источника, пролететь через D_3 , затем через E_1 и, наконец, через отверстие I и т. д. Каждой из этих траекторий соответствует своя собственная амплитуда, и полная амплитуда вероятности будет их суммой.

Предположим теперь, что мы увеличиваем число отверстий в экранах D и E до тех пор, пока от экранов ничего не останется.

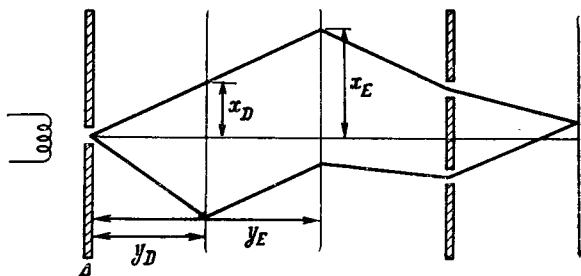
Траектория электрона должна определяться в этом случае высотой x_D , на которой электрон пересекает несуществующий экран D , расположенный от источника на расстоянии y_D , а также высотой x_E и расстоянием y_E , как это показано на фиг. 1.10. Каждой



Фиг. 1.9. Опыт с несколькими отверстиями в экранах.

Когда в экранах D и E , помещенных между источником на экране A и конечной точкой на экране C , проделано несколько отверстий, для каждого электрона имеется несколько альтернативных траекторий. Каждой из этих траекторий соответствует своя амплитуда вероятности. Чтобы определить результат какого-либо эксперимента, в котором открыты все отверстия, необходимо просуммировать все эти амплитуды по одной для каждой возможной траектории.

паре значений x_D и x_E здесь соответствует своя амплитуда. Принцип суперпозиции по-прежнему остается в силе, и мы должны взять сумму (теперь уже интеграл) этих амплитуд по всем возможным значениям x_D и x_E .



Фиг. 1.10. Число отверстий стремится к бесконечности.

В экранах, расположенных на расстояниях y_D и y_E от экрана A , проделывается все большее и большее число отверстий. В конце концов экраны полностью заполняются отверстиями, и получается непрерывная область точек вверх и вниз от центров экранов, в которых электрон может пересекать линию экрана. В этом случае сумма альтернатив превращается в двойной интеграл по непрерывным параметрам x_D и x_E — альтернативным высотам, на которых электрон пересекает экраны.

Следующий шаг, очевидно, состоит в размещении между источником и отверстиями все большего и большего числа экранов, причем каждый из них должен сплошь покрываться отвер-

ствиями. Продолжая этот процесс, мы будем все более уточнять траекторию электрона, пока, наконец, не придем к вполне разумному выводу, что траектория является просто определенной функцией высоты от расстояния, т. е. $x = x(y)$. При этом мы должны применять принцип суперпозиции до тех пор, пока не получим интеграл от амплитуды по всем траекториям.

Теперь можно дать значительно более точное описание движения. Мы можем не только представить себе определенную траекторию $x = x(y)$ в пространстве, но и точно указать *момент времени*, в который проходит каждая пространственная точка. Следовательно, траектория (в нашем двумерном случае) будет задана, если известны две функции: $x(t)$ и $y(t)$. Таким образом, мы приходим к представлению об амплитуде, соответствующей определенной траектории $x(t)$, $y(t)$. Полная амплитуда вероятности попадания в конечную точку представляет собой сумму или интеграл от этой амплитуды по всем возможным траекториям.

Задаче более точного математического определения такого понятия суммы или интеграла по всем траекториям будет посвящена гл. 2.

Там же мы получим выражение амплитуды вероятности для любой заданной траектории. После того как это выражение найдено, законы нерелятивистской квантовой механики оказываются полностью установленными и останется лишь продемонстрировать их применение в ряде интересных специальных случаев.

§ 5. Над чем еще следует подумать

Мы увидим, что в квантовой механике амплитуды ϕ являются решениями строго детерминистского уравнения, уравнения Шредингера в том смысле, что если амплитуда ϕ известна в момент времени $t = 0$, то мы будем знать ее и во все последующие моменты времени. Истолкование же $|\phi|^2$ как вероятности события — индетерминистское. Оно означает, что нельзя точно предсказать результат эксперимента. Весьма примечательно, что такое истолкование не приводит к каким-либо внутренним противоречиям. Это было показано Гейзенбергом, Бором, Борном, Нейманом и многими другими физиками на примере огромного количества частных случаев. Однако, несмотря на все эти исследования, нельзя считать доказанным, что такие противоречия никогда не смогут возникнуть. По этой причине квантовая механика кажется новичку трудной и до некоторой степени таинственной дисциплиной. Тайна постепенно уменьшается по мере того, как разбирается все большее число примеров, но никогда не исчезает полностью ощущение, что у этого предмета есть что-то необычное.

Существует несколько проблем, связанных с интерпретацией, над которыми можно было бы еще поработать. Эти проблемы трудно изложить, пока они еще полностью не разработаны. Одна из них — это доказать, что вероятностная интерпретация функции ψ является *единственной* последовательной интерпретацией этой величины. Мы и наши измерительные средства составляем часть природы и, следовательно, должны в принципе описываться функцией, удовлетворяющей детерминистскому уравнению. Почему же мы можем предсказать лишь вероятность того, что данный эксперимент приведет к некоторому определенному результату? Откуда возникает неопределенность? Почти нет сомнения, что она возникает из необходимости усиливать эффекты одиночных атомных событий до уровня, доступного наблюдению с помощью больших систем. Детали же должны изучаться только на основе предположения, что $|\psi|^2$ есть вероятность, а последовательность этой гипотезы уже доказана. Было бы интересно показать, что нельзя предложить *никакого другого* последовательного истолкования этой величины.

Другие вопросы, которые можно было бы изучать, связаны с теорией познания. На первый взгляд кажется, что в нашем описании мира нет симметрии по оси времени, и наше знание прошлого качественно отличается от знания будущего. Почему нам доступна только вероятность будущего события, в то время как достоверность прошедшего события часто может считаться очевидной? Эти вопросы следует проанализировать более тщательно. Впрочем, чтобы внести ясность, может быть, стоит сказать несколько больше. Видимо, здесь мы снова сталкиваемся с последствиями макроскопических размеров нас самих и наших приборов. На самом деле не должно быть обычного разделения на наблюдаемого и наблюдателя, применяемого нами сейчас при анализе измерений в квантовой механике; этот вопрос требует обстоятельного изучения. Что, по-видимому, действительно нужно, — это статистическая механика макроскопических приборов, усиливающих изучаемый эффект.

В сущности изучение таких вопросов представляет собой предмет философии; для дальнейшего развития физики в нем нет необходимости. Мы знаем, что у нас есть последовательная интерпретация функции ψ и что она, почти несомненно, является единственной. Задачей сегодняшнего дня представляется открытие законов, описывающих поведение функции ψ в случае явлений с участием мезонов и атомных ядер. Интерпретация функции ψ представляет интерес, однако значительно более интригующим является вопрос: какие изменения в наших представлениях потребуются для того, чтобы мы смогли изучать явления внутриядерных масштабов?

§ 6. Цель этой книги

Выше мы установили форму, в которой следует выражать законы квантовой механики, т. е. ввели амплитуду вероятности и в общих чертах наметили путь к ее вычислению. Однако возможны и другие формулировки. При более привычном подходе к квантовой механике амплитуду вероятности вычисляют, решая волновое уравнение определенного типа. В случае частиц с малой скоростью оно называется уравнением Шредингера. Более точным уравнением, справедливым и для тех электронов, чья скорость сколь угодно близка к скорости света, является уравнение Дирака. В этом случае амплитуда вероятности представляет собой некоторое гиперкомплексное число. В нашей книге мы не будем рассматривать уравнение Дирака и не будем также исследовать эффекты, связанные со спином. Вместо этого ограничим свое внимание электронами низких энергий и немного продвинемся в направлении квантовой электродинамики путем изучения фотонов — частиц, поведение которых определяется уравнениями Максвелла.

Правила вычисления амплитуды вероятности для нерелятивистских задач мы выводим в этой книге несколько непривычным способом. Иногда, особенно при первом знакомстве с основами квантовой механики, этот способ может быть более предпочтителен; в других же случаях, например при выполнении расчетов в простых задачах и при изучении уже имеющейся литературы, он не дает преимуществ.

Традиционному подходу, основанному на уравнении Шредингера, посвящено уже много книг; взгляды же, которые будут изложены ниже, представлены лишь в сокращенном виде в нескольких журнальных статьях [1]. Главная цель нашей книги — собрать работы, выполненные в этом направлении, в один том, где их можно изложить достаточно ясно и подробно. Такая книга оказалась бы полезной для студентов, интересующихся этими вопросами.

Чтобы остаться в разумных границах, мы не будем делать полного построения квантовой механики. Вместо этого всякий раз, когда дальнейшее разъяснение лучше всего было бы проводить с помощью обычных аргументов, имеющих в других книгах, мы будем отсылать читателя к этим источникам. Вследствие такой неполноты наша книга не является замкнутым учебником по квантовой механике. Она может служить лишь введением в ее основные понятия и должна использоваться совместно с другой книгой, где излагались бы уравнение Шредингера, матричная механика и различные приложения квантовой механики.

С другой стороны, освободившееся место мы используем для рассмотрения приложений применяемых в квантовой механике математических методов к другим областям физики.

Отыскание строгого метода вычисления амплитуд вероятностей процессов с участием таких (представляющихся сейчас более сложными) частиц, как нуклоны и мезоны, является задачей будущего. Конечно, можно надеяться, что после открытия неизвестных нам еще законов мы получим возможность вычислять амплитуды для любых процессов. Однако сегодняшняя ситуация, видимо, не аналогична той, которая предшествовала появлению квантовой механики.

В двадцатые годы многие предполагали, что неправильными являются фундаментальные теоремы и концепции классической механики, поскольку в то время существовало много парадоксов. Общие законы могли быть получены независимо от рассматривавшихся конкретных сил. Некоторые из этих законов оказались несправедливыми. Например, каждая спектральная линия указывала на наличие в атоме отдельной степени свободы; при температуре T каждая такая степень свободы должна была бы иметь энергию kT и вносить вклад R в общую удельную теплоемкость. Однако столь высокая удельная теплоемкость, которую можно было ожидать в соответствии с огромным числом известных спектральных линий, на опыте не проявлялась.

В настоящее время представляется правильной любая общая закономерность, которую (как, например, свойства углового момента) мы в состоянии вывести непосредственно из принципа суперпозиции амплитуд вероятности. В то же время детали взаимодействий все еще ускользают от нас. Это наводит на мысль, что амплитуды вероятности будут существовать и в будущей теории, однако метод их вычисления может оказаться для нас весьма необычным.

КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИЙ ЗАКОН ДВИЖЕНИЯ

В этой главе мы намерены завершить построение нерелятивистской квантовой механики, начатое нами в гл. 1. Мы уже отметили, что для каждой траектории существует своя амплитуда вероятности; теперь мы установим вид этой амплитуды. Для простоты ограничимся пока случаем одномерного движения частицы. Пусть ее положение в любой момент времени t может быть определено координатой x ; под траекторией будем понимать тогда функцию $x(t)$.

Если частица в начальный момент времени t_a начинает движение из точки x_a и приходит в конечную точку x_b в момент времени t_b , то будем просто говорить, что частица движется из a в b , а функция $x(t)$ обладает свойством $x(t_a) = x_a$, $x(t_b) = x_b$.

Тогда в квантовомеханическом описании получим амплитуду вероятности перехода из точки a в точку b , называемую обычно *ядром*, которую обозначим через $K(b, a)$. Эта амплитуда будет суммой вкладов от всех возможных траекторий между точками a и b в противоположность классической механике, где две точки соединяет одна и только одна так называемая *классическая траектория*. Последнюю будем обозначать как $\bar{x}(t)$. Прежде чем перейти к формулировке законов для квантовомеханического случая, вспомним ситуацию, которая имеет место в классической механике.

§ 1. Действие в классической механике

Одним из наиболее изящных способов выразить условия, выделяющие из всех возможных траекторий определенную траекторию $\bar{x}(t)$, является *принцип наименьшего действия*. Допустим, что существует некоторая величина S , которую можно вычислить для каждой траектории. Классическая траектория $\bar{x}$ — это та, для которой S принимает минимальное значение. Фактически используют только условие экстремальности действия; иными словами, значение S в первом приближении не изменится, если незначительно отступить от траектории $\bar{x}(t)$.

Величина S задается выражением

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt, \quad (2.1)$$

где L — лагранжиан системы. Для частицы с массой m , движущейся в потенциальном поле $V(x, t)$, которое является функцией координаты и времени, лагранжиан запишется как

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t). \quad (2.2)$$

Вид экстремальной траектории $\bar{x}(t)$ находится с помощью обычных вариационных методов. Допустим, например, что траектория отличается от $\bar{x}$ на величину $\delta x(t)$. Условие того, что конечные точки траектории x фиксированы, требует, чтобы

$$\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0. \quad (2.3)$$

Условие экстремальности для S , соответствующего классической траектории $\bar{x}$, означает, что

$$\delta S = S[\bar{x} + \delta x] - S[\bar{x}] = 0 \quad (2.4)$$

с точностью до первого порядка малости по δx . Используя определение (2.1), мы можем далее написать

$$\begin{aligned} S[x + \delta x] &= \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x} + \delta \dot{x}, x + \delta x, t) dt = \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left[L(\dot{x}, x, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right] dt = \\ &= S[x] + \int_{t_a}^{t_b} \left(\delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt. \end{aligned} \quad (2.5)$$

После интегрирования по частям вариация S примет вид

$$\delta S = \delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \delta x \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right] dt. \quad (2.6)$$

Так как на концах траектории $\delta x = 0$, то первый член в правой части этого выражения равен нулю. В промежуточных точках δx может принимать произвольное значение; поэтому экстремальное значение S отвечает той траектории, в каждой точке которой

всегда выполнено равенство

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \quad (2.7)$$

Это и есть классическое уравнение движения в лагранжевой форме.

В классической механике важен вид интеграла $S = \int L dt$, а не его экстремальное значение $S_{\text{кл}}$. Это обусловлено тем, что для определения траектории, соответствующей наименьшей величине действия, необходимо знать действие S для всего семейства близлежащих траекторий.

В квантовой механике важны как сам вид интеграла S , так и его значение в точке экстремума. Вычислим экстремальное значение S для нескольких случаев.

Задача 2.1. Для свободной частицы лагранжиан $L = m\dot{x}^2/2$. Покажите, что действие, соответствующее классическому движению такой частицы,

$$S_{\text{кл}} = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}. \quad (2.8)$$

Задача 2.2. Лагранжиан гармонического осциллятора $L = (m/2)(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$. Покажите, что классическое действие

$$S_{\text{кл}} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b, \quad (2.9)$$

где $T = t_b - t_a$.

Задача 2.3. Вычислите $S_{\text{кл}}$ для частицы, на которую действует постоянная сила F , т. е. когда лагранжиан $L = m\dot{x}^2/2 - Fx$.

Задача 2.4. В классической механике импульс

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \quad (2.10)$$

Покажите, что в начальной точке траектории импульс равен

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right)_{x=x_a} = \frac{\partial S_{\text{кл}}}{\partial x_a}. \quad (2.11)$$

З а м е ч а н и е. Для этого надо рассмотреть изменение соотношения (2.6) при варьировании в конечных точках.

Задача 2.5. Энергия в классической механике определяется выражением

$$E = L - \dot{x}p. \quad (2.12)$$

Покажите, что в конечной точке траектории энергия равна

$$L(x_b) - \dot{x}_b \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right)_{x=x_b} = \frac{\partial S_{\text{кл}}}{\partial t_b}. \quad (2.13)$$

З а м е ч а н и е. Вариация по времени в конечной точке приводит к изменению траектории, так как все траектории должны быть классическими.

§ 2. Квантовомеханическая амплитуда вероятности

Теперь мы можем сформулировать квантовомеханическое правило вычисления амплитуды вероятности. Для этого необходимо установить, какой вклад вносит каждая траектория в полную амплитуду перехода из точки a в точку b . Дело в том, что вклад дают сразу все траектории, а не только та, которая соответствует экстремальному действию. При этом вклады отдельных траекторий равны по величине, но различаются значением фазы; фаза данного вклада будет равна действию S для этой траектории, выраженному в единицах кванта действия $\hbar$. Таким образом, подводим итог: вероятность $P(b, a)$ перехода частицы из точки x_a , где она находилась в момент времени t_a , в точку x_b , соответствующую моменту времени t_b , равна квадрату модуля амплитуды перехода $P(b, a) = |K(b, a)|^2$. Эта амплитуда представляет собой сумму вкладов $\varphi[x(t)]$ от каждой траектории в отдельности, т. е.

$$K(b, a) = \sum_{\substack{\text{по всем} \\ \text{возможным} \\ \text{переходам} \\ \text{из } a \text{ в } b}} \varphi[x(t)], \quad (2.14)$$

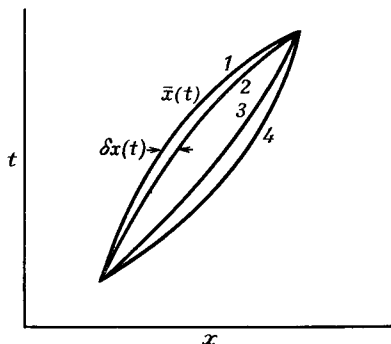
где суммирование выполняется по всем траекториям, соединяющим точки a и b . Фаза вклада каждой траектории пропорциональна действию S :

$$\varphi[x(t)] = \text{const} \cdot e^{(i/\hbar)S[x(t)]}. \quad (2.15)$$

Действие S здесь то же самое, что и в случае соответствующей классической системы [см. выражение (2.1)]. Константу можно выбрать из соображений удобства нормировки величины K ; это мы сделаем после того, как более строго (с математической точки зрения) рассмотрим, что понимается под суммой по всем траекториям в соотношении (2.14).

§ 3. Классический предел

Прежде чем перейти к более строгому рассмотрению, сравним наше квантовое правило с классическим. С первого взгляда остается совершенно неясным, каким образом в классическом приближении наиболее важной окажется всего лишь одна траектория, тогда как из выражения (2.15) следует, что все траектории



Ф и г. 2.1. Классическая траектория 1 [$x = \bar{x}(t)$].

Это такая траектория, для которой интеграл действия S принимает минимальное значение. Если эта траектория изменяется на величину $\delta x(t)$ (траектория 2), то в первом приближении по δx интеграл не претерпевает никаких изменений. Это и определяет уравнение движения.

В квантовой механике амплитуда вероятности перехода из точки a в точку b равна сумме амплитуд, соответствующих всем возможным траекториям. Амплитуда вероятности для заданной траектории, т. е. $e^{iS/\hbar}$, имеет фазу, пропорциональную действию. Если действие очень велико по сравнению с постоянной Планка $\hbar$, то для близлежащих траекторий, таких, как 3 и 4, оно лишь незначительно отличается по своей величине, однако вследствие малости постоянной $\hbar$ различие в фазах в этих случаях будет очень большим. Вклады от таких траекторий взаимно уничтожаются. Только в непосредственной близости к классической траектории $\bar{x}(t)$, где варьирование траекторий лишь незначительно изменяет действие S , близлежащие траектории, такие, как 1 и 2, дают вклады с одинаковыми фазами, которые вследствие интерференции усиливают друг друга. Вот почему приближение классической физики, т. е. необходимость рассмотрения только одной траектории $\bar{x}(t)$, справедливо, когда действие S очень велико по сравнению с постоянной $\hbar$.

вносят в амплитуду одинаковый вклад, хотя и с различными фазами. Однако классическое приближение соответствует случаю, в котором размеры, массы, интервалы времени и другие параметры системы настолько велики, что действие S во много раз превосходит постоянную $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$ эрг·сек. В этом случае фаза $S/\hbar$ каждого нарциального вклада представляет собой чрезвычайно большой угол. Действительная (или мнимая) часть функции φ равна косинусу (или синусу) этого угла и в равной степени может оказаться как положительной, так и отрицательной. Если теперь, как показано на фиг. 2.1, мы сдвинем траекторию на малую величину δx (малую в смысле классических масштабов), то изменение действия S также будет небольшим в клас-

сическом смысле, однако отнюдь не малым при сопоставлении с величиной $\hbar$. Эти небольшие изменения траектории будут, вообще говоря, приводить к огромным изменениям фазы, так что ее косинус и синус совершают очень быстрые и частые колебания между положительными и отрицательными значениями. Таким образом, если одна траектория дает положительный вклад, то другая, бесконечно близкая к ней (в классическом смысле), дает такой же отрицательный вклад, так что в целом не возникает никакого вклада.

Поэтому данную траекторию можно фактически не учитывать, если соседние с ней имеют различное действие, поскольку их вклады взаимно уничтожаются. Однако у некоторой траектории $\bar{x}$, для которой действие экстремально, небольшие изменения δx (во всяком случае, в первом приближении) не меняют величины S . Все вклады от траекторий, находящихся в этой области, близки по фазе, которая равна здесь $S_{\text{кл}}/\hbar$, и взаимно не уничтожаются. Следовательно, существенный вклад мы можем получить лишь в окрестности траектории $\bar{x}$ и в классическом приближении должны рассматривать только эту траекторию как единственно важную. Именно так классические законы движения получаются из квантовых законов.

Можно здесь же отметить, что траектории, которые не совпадают с $\bar{x}$, дают вклад лишь в той области, где действие S отличается от $S_{\text{кл}}$ на величину порядка $\hbar$. Классическая траектория в этой небольшой области остается неопределенной, что и ограничивает точность, с которой она выделяется.

Рассмотрим теперь зависимость фазы от положения конечной точки (x_b, t_b) . Если мы немного сместим эту точку, то фаза изменится очень сильно, что приведет к быстрым изменениям ядра $K(b, a)$. Будем под «гладкой функцией» понимать функцию вида $S_{\text{кл}}$, которая заметно меняется лишь при значительных изменениях аргумента. В этом смысле амплитуде $K(b, a)$ весьма далеко до гладкости. Однако приведенные соображения показывают, что в классическом приближении она имеет вид

$$K(b, a) = \text{«гладкая функция»} \cdot e^{(i/\hbar)S_{\text{кл}}}. \quad (2.16)$$

Все эти нестрогие рассуждения допустимы лишь в тех случаях, для которых мы можем ожидать применимости классической физики ($S \gg \hbar$). Однако на атомном уровне действие S может быть сравнимо с величиной $\hbar$, и тогда в выражении (2.14) должны учитываться все траектории. В этом случае не существует какой-либо траектории, имеющей преимущественное значение, и, конечно, выражение (2.16) не обязательно является

хорошим приближением. Для того чтобы рассматривать подобные случаи, необходимо найти способ вычисления сумм, аналогичных выражению (2.14).

§ 4. Сумма по траекториям

Аналогия с интегралом Римана. Хотя качественно идея суммирования вкладов от всех траекторий вполне ясна, необходимо все же дать математически более строгое определение этой суммы. Множество траекторий содержит бесконечное количество элементов и не ясно, какая мера может быть сопоставлена пространству траекторий. Математическое определение такой меры и является целью этого параграфа. Как окажется далее, это определение довольно неудобно для конкретных вычислений. В последующих главах будут описаны другие, более эффективные способы вычисления сумм по траекториям. Что касается данной главы, то можно надеяться, что математические трудности, или скорее отсутствие изящества в изложении, не отвлекут читателя от физического содержания излагаемых понятий.

Начнем с рассмотрения обычного интеграла Римана. Допустим (очень грубо), что площадь A под кривой равна сумме всех ее ординат; лучше было бы сказать, что она пропорциональна этой сумме. Чтобы уточнить приведенное утверждение, поступим следующим образом: выберем какое-нибудь подмножество ординат (например, ординаты в точках x_i , разделенных равными отрезками длины h). Складывая эти ординаты, получаем

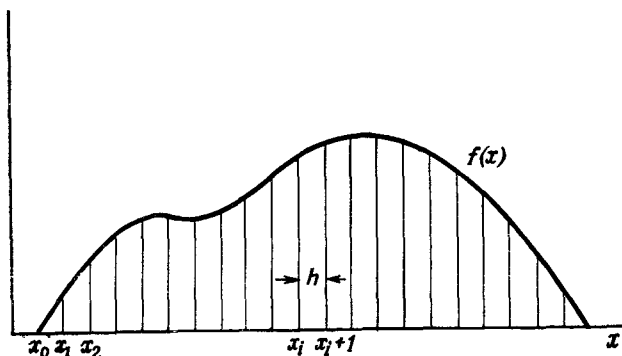
$$A \sim \sum_i f(x_i), \quad (2.17)$$

где суммирование проводится по конечному числу точек x_i , как показано на фиг. 2.2.

Следующий шаг состоит в определении площади A как предела этой суммы, когда подмножество точек x_i (а следовательно, и выбранное подмножество ординат) становится более плотным или, точнее, когда подмножество становится более полным представлением плотного множества, поскольку конечное множество никогда не является какой-либо измеримой частью бесконечного континуума¹⁾. Мы можем перейти к пределу обычным способом, непрерывно уменьшая величину h . Однако, поступая таким образом, мы получили бы различные суммы для разных значений h , и в этом процессе никакого предела не существо-

¹⁾ Это утверждение следует понимать в том смысле, что конечное множество всегда имеет меру нуль независимо от того, какую меру имеет содержащее его бесконечное, континуальное множество.— *Прим. ред.*

вало бы. Чтобы получить искомый предел, необходимо выбрать некоторый нормирующий множитель, который должен зависеть



Ф и г. 2.2. Определение интеграла.

При построении обычного риманова интеграла набор ординат проводится от оси абсцисс до рассматриваемой кривой. Расстояние между ординатами равно h . Интеграл (площадь, ограниченная кривой и осью абсцисс) аппроксимируется произведением величины h на сумму ординат. Это приближенное выражение стремится к точному значению при $h \rightarrow 0$.

Аналогичное определение может быть использовано для интегралов по траекториям. Мера, устремляемая к нулю в предельном процессе, равна интервалу времени ε , разделяющему дискретные точки на траекториях.

от h . Для интеграла Римана, очевидно, таким множителем является сама величина h . В этом случае предел существует, и мы можем написать выражение

$$A = \lim_{h \rightarrow 0} \left[h \sum_i f(x_i) \right]. \quad (2.18)$$

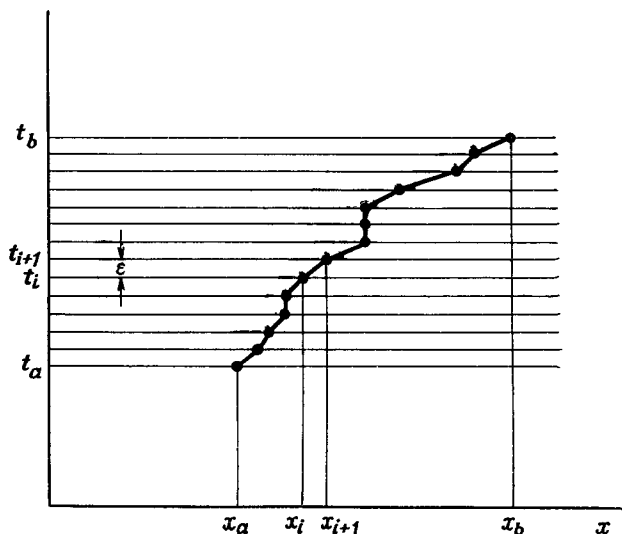
Построение суммы. При определении суммы по траекториям мы можем поступить аналогичным образом. Во-первых, выберем некоторое подмножество траекторий. Чтобы сделать это, разобьем область изменения независимой переменной (времени) на интервалы длиной ε . Это даст нам в интервале от t_a до t_b набор моментов t_i (разделенных ε -отрезками), каждому из которых поставили в соответствие точку x_i . Соединяя все полученные точки отрезками прямых линий, мы получаем траекторию. Сумму по всем найденным таким образом траекториям можно определить, вычислив кратный интеграл по всем значениям x_i ($i = 1, 2, \dots, N-1$):

$$\begin{aligned} N\varepsilon &= t_b - t_a, \\ \varepsilon &= t_{i+1} - t_i, \\ t_0 &= t_a, \quad t_N = t_b, \\ x_0 &= x_a, \quad x_N = x_b. \end{aligned} \quad (2.19)$$

В результате получим выражение

$$K(b, a) \sim \int \int \dots \int \varphi[x(t)] dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}. \quad (2.20)$$

Интегрирование не производится по x_0 и x_N , так как эти переменные совпадают с фиксированными концами траекторий x_a и x_b . Это выражение формально соответствует соотношению (2.17). Уменьшая ε , мы можем получить более полное представление



Ф и г. 2.3. Сумма по всем траекториям.

Она определяется как предел, в котором траектория первоначально задается лишь координатами x для большого числа фиксированных моментов времени, разделенных очень малыми интервалами длины ε . Тогда сумма по траекториям равна интегралу по всем этим выбранным координатам. Наконец для определения меры берется предел при $\varepsilon \rightarrow 0$.

множества всех возможных траекторий, соединяющих точки a и b . Однако точно так же, как и в случае интеграла Римана, невозможно достичь предела этого процесса, так как такой предел не существует. Мы снова должны ввести некоторый нормирующий множитель, который, как и следует ожидать, будет зависеть от ε .

К сожалению, определение такого нормирующего множителя оказывается весьма трудной задачей, и неизвестно, как это делать в общем случае. Однако нам это удастся сделать для всех задач, которые до сих пор имели практическое значение. Возьмем, например, случай, когда лагранжиан задается выражением (2.2).

Нормирующий множитель в этом случае равен A^{-N} , где

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right)^{1/2}. \quad (2.21)$$

Как получен этот результат, мы увидим далее (см. § 1 гл. 4). С учетом множителя A переход к пределу имеет смысл, и мы можем написать

$$K(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \int \dots \int e^{(i/\hbar)S[b, a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A}, \quad (2.22)$$

где

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \quad (2.23)$$

представляет собой однократный интеграл вдоль траектории, проходящей, как это показано на фиг. 2.3, через все соединенные прямолинейными отрезками точки x_i .

Возможно и более изящное определение траектории. Для соединения точек x_i и x_{i+1} вместо отрезков прямых линий мы могли бы использовать отрезки классической траектории. Тогда можно было бы сказать, что S — это наименьшее значение интеграла, взятого от лагранжиана по всем траекториям, которые проходят через выбранные точки (x_i, t_i) . При таком определении нет необходимости прибегать к каким-то не имеющим физического смысла переходам по отрезкам прямых.

Интеграл по траекториям. Имеется много способов выбрать некоторое подмножество из всех траекторий, проходящих через точки a и b . Применявшийся нами способ, возможно, не является наилучшим с точки зрения математики. Предположим, например, что лагранжиан зависит от ускорения в точках x . В нашем способе построения траектории скорость имеет разрывы во всех точках (x_i, t_i) , и, следовательно, ускорение в этих точках бесконечно велико. Это могло бы привести к затруднениям, но в тех немногих примерах, с которыми мы уже имели дело, вполне законной была замена

$$\ddot{x} = \frac{1}{\varepsilon^2} (x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}). \quad (2.24)$$

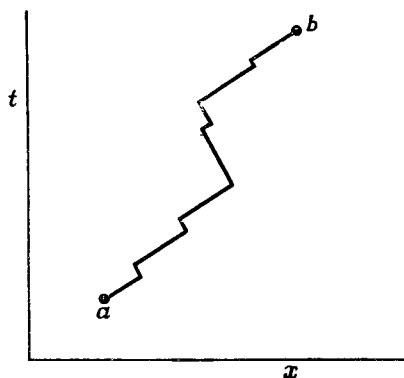
Могут быть случаи, когда такая замена непригодна или неточна и использовать наше определение суммы по траекториям становится весьма затруднительно. Такая ситуация возникает уже при обычном интегрировании, если некорректно определение интеграла по Риману, задаваемое равенством (2.18), и приходится обращаться к другим определениям, например к интегралу Лебега.

Необходимость уточнить способ интегрирования вовсе не дискредитирует саму идею. Просто речь идет о том, что возможные неудобства, связанные с нашим определением суммы по траекториям [см. выражение (2.22)], в конечном счете могут потребовать формулировки новых определений. Тем не менее сама идея суммирования по всем траекториям, подобно идее обычного интеграла, не зависит от специфики определения и сохраняет смысл, несмотря на недостатки некоторых частных построений. Поэтому, пользуясь менее связывающими обозначениями, мы будем записывать сумму по траекториям как

$$K(b, a) = \int_a^b e^{(i/\hbar)S[b, a]} \mathcal{D}x(t) \quad (2.25)$$

и называть ее *интегралом по траекториям*. Это обстоятельство отметим введением знака $\mathcal{D}$ вместо оператора дифференциала d . Лишь изредка мы будем возвращаться к выражению типа (2.22).

Задача 2.6. Класс функционалов, на котором можно определить интегралы по траекториям, оказывается неожиданно широким. До сих пор мы рассматривали лишь функционалы



Ф и г. 2.4. Траектория релятивистской частицы, движущейся в двух измерениях.

Это зигзагообразная линия с прямолинейными отрезками. Наклон прямых постоянен по величине и различается только знаком в обеих частях зигзага. Амплитуда вероятности для некоторой частной траектории, так же как и ядро, описывающее переход из точки a в точку b , зависит от числа поворотов R на траектории; это следует из выражений (2.26) и (2.27).

типа (2.15). Теперь перейдем к рассмотрению совсем иного типа функционалов, возникающих в одномерной релятивистской задаче. Предположим, что движущаяся по прямой частица может перемещаться только вперед и назад со скоростью света. Для

удобства выберем такие масштабы измерений, чтобы скорость света, масса частицы и постоянная Планка равнялись единице. Тогда в плоскости (x, t) все траектории движения такого осциллятора имеют наклон $\pm\pi/4$, как показано на фиг. 2.4. Амплитуду, соответствующую одной из таких траекторий, можно определить следующим образом: разделим время на малые интервалы длиной ϵ и предположим, что изменение направления движения может происходить только на границе этих интервалов, т. е. в моменты времени $t = t_a + n\epsilon$, где n — целое число. В такой релятивистской задаче амплитуда перехода вдоль рассматриваемой траектории отличается от амплитуды (2.15); правильным в данном случае будет выражение

$$\varphi = (i\epsilon)^R, \quad (2.26)$$

где R — число точек поворота на траектории.

В качестве упражнения читатель может использовать это выражение для того, чтобы вычислить ядро $K(b, a)$, суммируя вклады от траекторий с одной, двумя и т. д. точками поворота. Это даст

$$K(b, a) = \sum_R N(R) (i\epsilon)^R, \quad (2.27)$$

где $N(R)$ — число возможных траекторий с R точками поворота. Лучше всего вычислять четыре отдельные величины K , а именно: $K_{++}(b, a)$ — амплитуду перехода из точки a , где скорость частицы была положительной (т. е. направленной вдоль оси x), в точку b , в которой ее скорость также положительна; $K_{+-}(b, a)$ — амплитуду перехода из точки a , где частица имела отрицательную скорость, в точку b , куда частица приходит с положительной скоростью; аналогично определены амплитуды K_{-+} и K_{--} .

Предположим теперь, что время измеряется в единицах $\hbar/mc^2$. Покажите, что если интервал времени очень велик ($t_b - t_a \gg \gg \hbar/mc^2$), а средняя скорость мала [$x_b - x_a \ll c(t_b - t_a)$], то ядро [если не считать множителя $\exp(imc^2/\hbar)(t_a - t_b)$] совпадает с выражением для свободной частицы [см. (3.3)]. Приведенные здесь выражения амплитуды и ядра справедливы для одномерного движения свободной релятивистской частицы, и результат совпадает с решением уравнения Дирака для этого случая.

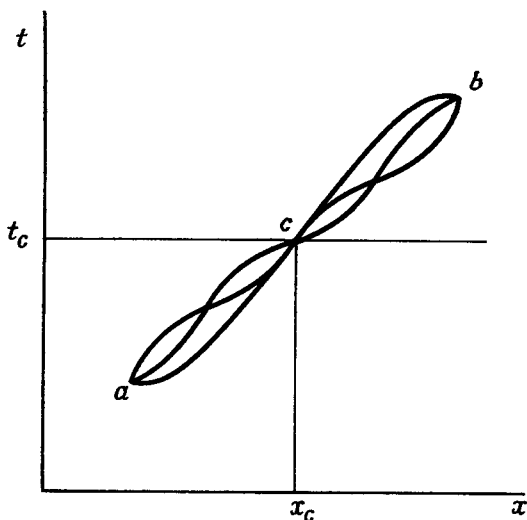
§ 5. Последовательные события

Правило для двух событий. В этом параграфе мы выведем важный закон сложения амплитуд вероятностей событий, которые происходят последовательно во времени. Предположим, что t_c — некоторый момент времени в промежутке между t_a и t_b .

Тогда действие, соответствующее произвольной траектории между точками a и b , может быть записано как

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a]. \quad (2.28)$$

Это следует из определения действия как интеграла по времени от функции Лагранжа L , а также из того, что L не зависит от производных более высокого порядка, чем скорость. (В противном случае нам пришлось бы в точке c определять значения



Фиг. 2.5. Вычисление суммы по траекториям.

Один из способов, которым может быть вычислена сумма по всем траекториям, заключается в суммировании по всем траекториям, проходящим через точку x_c в момент времени t_c , и в последующем суммировании по точкам x_c .

Для каждой траектории, выходящей из точки a в точку b через c , амплитуда вероятности равна произведению двух сомножителей: 1) амплитуды перехода из точки a в точку c и 2) амплитуды перехода из точки c в точку b . Следовательно, это справедливо также и для суммы по всем траекториям, проходящим через точку c : полная амплитуда перехода из точки a в точку b через c равна $K(b, c)K(c, a)$. Поэтому полную амплитуду перехода из точки a в точку b , т. е. соотношение (2.31), мы получим путем суммирования по всем альтернативам (по всем значениям x_c).

скорости и, возможно, производных более высокого порядка.) Используя равенство (2.25), которым определяется ядро, можно записать

$$K(b, a) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[b, c] + \frac{i}{\hbar} S[c, a]\right) \mathcal{D}x(t). \quad (2.29)$$

Точка c разделяет любую траекторию на два участка. Как показано на фиг. 2.5, концами первого будут x_a и $x_c = x(t_c)$, а концами второго — x_c и x_b . Можно проинтегрировать по всем

траекториям между точками a и c , а потом по всем траекториям между точками c и b и, наконец, результат проинтегрировать по всем возможным значениям x_c . При выполнении первого интегрирования $S[b, c]$ является постоянной. Поэтому результат можно записать в виде

$$K(b, a) = \int_{x_c}^b \int_c^b e^{(i/\hbar)S[b, c]} K(c, a) \mathcal{D}x(t) dx_c. \quad (2.30)$$

Выполнив интегрирование по всем траекториям от c до b , а затем по всем возможным значениям x_c , получим окончательно

$$K(b, a) = \int_{x_c} K(b, c) K(c, a) dx_c. \quad (2.31)$$

Быть может, рассуждения будут более понятными, если исходить из выражения (2.22). Выделим один из дискретных моментов времени t_k . Пусть $t_c = t_k$ и $x_c = x_k$. Сначала интегрируем по всем x_i , для которых $i < k$. Это приведет к появлению под знаком интеграла множителя $K(c, a)$. Далее интегрируем по всем x_i , для которых $i > k$; так получается множитель $K(b, c)$. После этого остается проинтегрировать по x_c , и результат запишется в виде (2.31).

Окончательный итог можно кратко сформулировать следующим образом. Любая из возможных траекторий между точками a и b однозначно определяется выбором точки x_c , которая отвечает моменту времени t_c . В случае частицы, движущейся из точки a в точку b , ядро можно вычислить, руководствуясь такими правилами:

- 1) ядро, соответствующее переходу из точки a в точку b , равняется сумме амплитуд перехода частицы из точки a в точку c и далее в точку b по всем возможным значениям величины x_c ;
- 2) амплитуда перехода из точки a в точку c и далее в точку b равна произведению ядер, соответствующих переходам из точки a в точку c и из точки c в точку b .

Таким образом, имеет место правило: *амплитуды последовательных во времени событий перемножаются.*

Обобщение правила на случай нескольких событий. Существует много приложений этого важного правила; некоторые из них будут изложены в последующих главах. Здесь же мы покажем, как оно применяется для того, чтобы получить выражение (2.22) другим способом.

Каждую траекторию можно делить на части двумя моментами времени: t_c и t_d . Тогда ядро, соответствующее частице, движущейся

щейся из точки a в точку b , можно записать в виде

$$K(b, a) = \int_{x_c} \int_{x_d} K(b, c) K(c, d) K(d, a) dx_c dx_d. \quad (2.32)$$

Это означает, что частица, которая движется из точки a в точку b , рассматривается так, как если бы она двигалась сначала из точки a в точку d , потом из точки d в точку c и, наконец, из точки c в точку b . Амплитуда, соответствующая такой траектории, есть произведение ядер, отвечающих каждой части траектории. Ядро, взятое по всем таким траекториям, проходящим из точки a в точку b , получается интегрированием этого произведения по всем возможным значениям переменных x_c и x_d .

Мы можем продолжать этот процесс до тех пор, пока весь интервал времени не разделится на N участков. В результате получим

$$K(b, a) = \int_{x_1} \int_{x_2} \dots \int_{x_{N-1}} K(b, N-1) K(N-1, N-2) \dots K(i+1, i) \dots K(1, a) dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}. \quad (2.33)$$

Это означает, что мы можем определить ядро способом, отличным от приведенного в соотношении (2.22). В этом новом определении ядро, соответствующее переходу частицы между двумя точками, разделенными бесконечно малым интервалом времени ε , имеет вид

$$K(i+1, i) = \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2} \right) \right]. \quad (2.34)$$

Последнее выражение является точным в первом приближении по ε . Тогда в соответствии с правилами перемножения амплитуд для событий, которые происходят последовательно во времени, мы получим выражение амплитуды, отвечающей всей траектории:

$$\varphi[x(t)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \prod_{i=0}^{N-1} K(i+1, i). \quad (2.35)$$

Используя затем правило сложения амплитуд, соответствующих альтернативным траекториям, приходим к определению ядра $K(b, a)$. Окончательное выражение, как можно видеть, совпадает с формулой (2.22).

§ 6. Некоторые замечания

В релятивистской теории электрона мы не сможем выразить амплитуду вероятности, соответствующую некоторой траектории, в виде $e^{iS/\hbar}$ или каким-либо другим простым способом. Тем не

менее правила сложения амплитуд останутся справедливыми (с некоторыми небольшими изменениями). Как и ранее, для каждой траектории существует амплитуда вероятности, которая по-прежнему задается выражением (2.35). Единственное различие состоит в том, что в релятивистской теории ядро $K(i+1, i)$ выражается уже не так просто, как это имеет место в соотношении (2.34). Трудности возникают в связи с необходимостью учитывать еще спин и возможность рождения электронно-позитронных пар.

В нерелятивистских системах с большим числом переменных и даже в квантовой теории электромагнитного поля остаются справедливыми не только установленные выше принципы сложения амплитуд, но и сама амплитуда вероятности подчиняется правилам, изложенным в этой главе. Именно движению, связанному с каждой переменной, отвечает амплитуда вероятности, фаза которой равна соответствующему действию, деленному на $\hbar$. Эти более сложные случаи мы рассмотрим в последующих главах.

ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ ИДЕЙ НА КОНКРЕТНЫХ ПРИМЕРАХ

В этой главе мы получим выражения для ядер, соответствующих некоторым определенным видам движения. Чтобы развить физическую интуицию в отношении движения, подчиняющегося законам квантовой механики, мы будем всегда выявлять физический смысл получаемых математических выражений; здесь же введем волновую функцию и выясним ее связь с ядром. Это явится первым шагом в установлении связи нашего подхода к квантовой механике с ее более традиционными формулировками.

Рассмотрим также некоторые специальные математические методы вычисления суммы по траекториям. Понятие суммы по всем траекториям было введено в гл. 2 с помощью некоторого специального указания о том, как именно надо проводить вычисление. Хотя это указание, возможно, и разъясняет суть дела, тем не менее оно неудобно для практического пользования. В этой главе изложены более простые методы, которые будут широко применяться в дальнейшем.

Таким образом, настоящая глава преследует три цели: углубить наше понимание квантовомеханических принципов, установить связь между нашим и другими подходами к квантовой механике и, наконец, ввести некоторые полезные математические методы.

§ 1. Свободная частица

Интеграл по траекториям. Для вычисления ядра, соответствующего движению свободной частицы, мы применим здесь метод, использованный в гл. 2 при определении суммы по всем траекториям. Для свободной частицы лагранжиан равен

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2}, \quad (3.1)$$

поэтому, учитывая выражения (2.21) — (2.23), мы можем записать ядро в виде

$$K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \int \dots \int \exp \left[\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{i-1})^2 \right] \times \\ \times dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{-N/2}. \quad (3.2)$$

Выражение в правой части представляет собой цепочку гауссовых интегралов, т. е. интегралов вида

$$\int [\exp(-ax^2)] dx \quad \text{или} \quad \int [\exp(-ax^2 + bx)] dx.$$

Поскольку интеграл от функции Гаусса снова является такой же функцией, мы можем проинтегрировать по каждой из переменных и затем перейти к пределу. В результате получим

$$K(b, a) = \left[\frac{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}{m} \right]^{-1/2} \exp \left[\frac{im (x_b - x_a)^2}{2\hbar (t_b - t_a)} \right]. \quad (3.3)$$

Вычисления здесь выполнялись следующим образом. Прежде всего следует заметить, что

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{m}{2i \hbar \epsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right\} dx_1 = \\ = \left(\frac{2\pi i \hbar \cdot 2\epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left[\frac{m}{2i \hbar \cdot 2\epsilon} (x_2 - x_0)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Умножим это выражение на функцию

$$\left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left[\frac{m}{2i \hbar \epsilon} (x_3 - x_2)^2 \right] \quad (3.5)$$

и снова проинтегрируем, на этот раз по переменной x_2 ; получим результат, совпадающий с правой частью равенства (3.4), если не считать того, что бином $(x_2 - x_0)^2$ заменяется на $(x_3 - x_0)^2$, а величина 2ϵ в двух местах заменяется на 3ϵ :

$$\left(\frac{2\pi i \hbar \cdot 3\epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left[\frac{m}{2i \hbar \cdot 3\epsilon} (x_3 - x_0)^2 \right].$$

Таким образом мы можем построить рекуррентный процесс, который после $(n-1)$ -го шага дает функцию

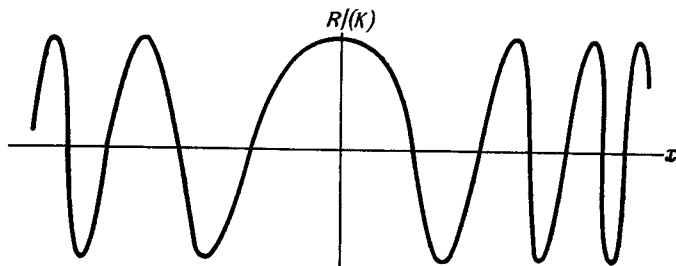
$$\left(\frac{2\pi i \hbar n \epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left[\frac{m}{2i \hbar \cdot n \epsilon} (x_n - x_0)^2 \right].$$

Поскольку $n\epsilon = t_n - t_0$, то легко видеть, что результат $(N-1)$ -го шага совпадает с выражением (3.3).

Существует и другой метод вычисления. Можно воспользоваться соотношением (3.4), чтобы выполнить интегрирование по всем переменным x_i с нечетным значением i (в предположении, что N четное). Получим выражение, формально совпадающее с формулой (3.2), но содержащее вдвое меньше переменных интегрирования. Оставшиеся переменные определены в моменты времени, отделенные друг от друга интервалом 2ϵ . Следовательно, по крайней мере в случае, когда N можно представить как 2^k , выражение (3.3) получается после k таких шагов.

Задача 3.1. Вероятность того, что частица попадет в точку b , по определению пропорциональна квадрату модуля ядра $K(b, a)$. В случае движения свободной частицы, для которого ядро определяется выражением (3.3), эта вероятность

$$P(b) dx = \frac{m}{2\pi\hbar (t_b - t_a)} dx. \quad (3.6)$$



Фиг. 3.1. Действительная часть амплитуды перехода в различные точки на расстоянии x от начала координат спустя время t .

Мнимая часть (не показана) представляет собой аналогичную волну, смещенную по фазе на 90° , так что модуль квадрата амплитуды — постоянная величина. Длина волны мала при больших x , т. е. при таких значениях, которые классическая частица может достичь, лишь если она движется с большой скоростью. В общем случае длина волны и классический импульс обратно пропорциональны друг другу (см. формулу (3.10)).

Ясно, что это относительная вероятность, так как интеграл по всем значениям x расходится. Что означает этот способ нормировки? Покажите, что он соответствует некоторому классическому движению, когда частица выходит из точки a с импульсом, все значения которого равновероятны. Покажите, что соответствующая относительная вероятность того, что импульс частицы лежит в интервале dp , равна $dp/2\pi\hbar$.

Импульс и энергия. Выясним теперь смысл ядра, описывающего свободное движение частицы. Для удобства выберем в качестве начала отсчета пространственных координат и времени точку a . Тогда амплитуда перехода в некоторую другую точку $b(x, t)$ будет иметь вид

$$K(x, t; 0, 0) = \left(\frac{2\pi i \hbar t}{m} \right)^{-1/2} e^{imx^2/2\hbar t}. \quad (3.7)$$

Если момент фиксирован, то эта амплитуда изменяется с расстоянием так, как это показано на фиг. 3.1, где представлена действительная часть выражения (3.7).

Мы видим, что по мере удаления от начала координат осцилляции становятся все более и более частыми. Если x настолько велико, что произошло уже много таких осцилляций, то рас-

стояние между соседними узлами почти постоянно, по крайней мере для нескольких ближайших осцилляций. Другими словами, амплитуда ведет себя как синусоида с медленно меняющейся длиной волны λ . Представляет интерес вычислить эту длину волны. При изменении x на длину волны λ фаза амплитуды должна увеличиться на 2π . Отсюда следует, что

$$2\pi = \frac{m(x+\lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar t} = \frac{m\lambda x}{\hbar t} + \frac{m\lambda^2}{2\hbar t}. \quad (3.8)$$

Пренебрегая величиной λ^2 по сравнению с $x\lambda$ (т. е. предположив, что $x \gg \lambda$), получаем

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m(x/t)}. \quad (3.9)$$

С точки зрения классической физики частица, переместившаяся из начала координат в точку x за время t , имеет скорость x/t и импульс mx/t . Когда в квантовой механике движение частицы можно адекватно описать классическим импульсом $p = mx/t$, соответствующая амплитуда вероятности изменяется в пространстве синусоидально и длина волны ее колебаний равна

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (3.10)$$

Это соотношение можно получить и в более общем случае. Предположим, что у нас есть некоторый прибор больших размеров, например магнитный анализатор, который собирает частицы с данным импульсом в заданную точку. Покажем, что если этот прибор достаточно велик и при работе с ним классическая физика является хорошим приближением, то амплитуда вероятности попадания частицы в наперед заданную точку в пространстве осциллирует с длиной волны, равной h/p . Как мы уже видели, ядро в этом случае можно аппроксимировать выражением

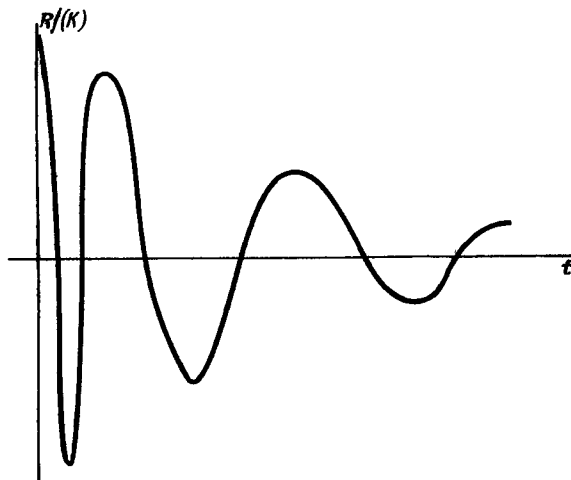
$$K \sim \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{кл}}(b, a) \right]. \quad (3.11)$$

Вариация положения конечной точки x_b вызывает изменение классического действия. Если это действие велико по сравнению с $\hbar$ (квазиклассическое приближение), то при изменении координаты x_b ядро K будет очень быстро осциллировать. Изменение фазы, приходящееся на единицу смещения конечной точки, составляет

$$k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{\text{кл}}}{\partial x_b}. \quad (3.12)$$

Но $\partial S_{\text{кл}}/\partial x_b$ есть не что иное, как классический импульс частицы в точке x_b (см. задачу 2.4) и, следовательно, $p = \hbar k$. Эта вели-

чина k представляет собой изменение фазы на единицу длины волны и называется волновым числом; ею очень удобно пользоваться. Поскольку на расстоянии, равном длине волны, фаза изменяется на 2π , то $k = 2\pi/\lambda$. Формула (3.12) представляет собой соотношение де Бройля, связывающее импульс частицы с его волновым числом.



Фиг. 3.2. Амплитуда вероятности найти частицу в заданной точке изменяется со временем.

Здесь показана действительная часть амплитуды. Частота колебаний пропорциональна энергии, которую должна была бы иметь частица, чтобы достичь заданной точки за время t .

Рассмотрим теперь временную зависимость ядра, описывающего свободное движение. Предположим, что расстояние фиксировано, а время переменное. Изменение действительной части ядра (3.7) показано на фиг. 3.2, где вдоль оси времени переменны как частота, так и амплитуда колебаний.

Пусть время t так велико, что зависимостью амплитуды колебаний от t можно пренебречь. По определению период колебаний T равен времени, в течение которого фаза возрастает на 2π ; тогда

$$2\pi = \frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar(t+T)} = \frac{mx^2}{2\hbar t^2} \left(\frac{T}{1+T/t} \right). \quad (3.13)$$

Введя угловую частоту $\omega = 2\pi/T$ и предположив, что $t \gg T$, это выражение можно записать как

$$\omega \approx \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{x}{t} \right)^2. \quad (3.14)$$

Так как величина $m(x/t)^2/2$ представляет собой классическую энергию свободной частицы, то это равенство утверждает, что

$$\text{энергия} = \hbar\omega. \quad (3.15)$$

Соотношение (3.15), равно как и связь между длиной волны и импульсом, справедливо в случае любого прибора, который можно адекватно описать на языке классической физики, и его, так же как соотношение (3.12), можно получить из более общих соображений.

В соответствии с выражением (3.11) любая вариация времени t_b в конечной точке приведет к быстрым осцилляциям ядра. Частота этих осцилляций

$$\omega = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{\text{кл}}}{\partial t}. \quad (3.16)$$

Величина $\partial S_{\text{кл}}/\partial t$ в классическом рассмотрении интерпретируется как энергия E (см. задачу 2.5), и, следовательно,

$$\omega = \frac{E}{\hbar}. \quad (3.17)$$

Таким образом, понятия импульса и энергии переносятся в квантовую механику с помощью следующих правил:

1) если амплитуда вероятности изменяется как e^{ikh} , то говорят, что частица имеет импульс $\hbar k$;

2) если эта амплитуда имеет определенную частоту, изменяясь с течением времени как $e^{-i\omega t}$, то говорят, что энергия равна $\hbar\omega$.

Мы только что показали, что эти правила согласуются с определением энергии и импульса в предельном классическом случае.

Задача 3.2. Покажите с помощью подстановки, что в случае свободной частицы, как только t_b превосходит t_a , ядро $K(b, a)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial K(b, a)}{\partial t_b} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 K(b, a)}{\partial x_b^2}. \quad (3.18)$$

§ 2. Дифракция при прохождении через щель

Мысленный эксперимент. Физическая интерпретация квантовой механики и ее связь с классической станут более понятными, если мы рассмотрим другой, немного более сложный пример. Предположим, что в момент времени $t = 0$ частица выходит из начала координат, а спустя время T мы находим ее в некоторой точке x_0 . В классической механике мы говорили бы, что частица обладает скоростью $v_0 = x_0/T$. При этом подразумевалось бы,

что если частица будет продолжать двигаться дальше, то за время τ она пройдет дополнительное расстояние $v_0\tau$. Чтобы проанализировать это с точки зрения квантовой механики, попытаемся решить следующую задачу.

В момент времени $t = 0$ частица выходит из начала координат $x = 0$. Пусть нам известно, что спустя время T она находится в окрестности $x_0 \pm b$ точки x_0 . Спрашивается, какова вероятность обнаружить частицу еще через время τ на расстоянии x от точки x_0 ? Амплитуду перехода в точку x в момент времени $t + \tau$ можно рассматривать как сумму вкладов от всех траекторий, соединяющих начало координат с конечной точкой, при условии, что в момент времени T соответствующие траектории лежат в интервале $x_0 \pm b$.

Эта амплитуда вычисляется очень быстро, однако стоит сначала разобрать, какого сорта эксперимент мы здесь рассматриваем. Каким образом можно узнать, что данная частица проходит в пределах $\pm b$ от точки x_0 ? Можно посмотреть, как обычно, находится ли частица в момент времени T в интервале $x_0 \pm b$. Это был бы наиболее естественный способ, однако вследствие сложного взаимодействия электрона с прибором детальный анализ его является (по сравнению с другими возможностями) несколько затруднительным.

Предположим, что в момент времени T нами просматривается, скажем, с помощью яркого света, вся ось x за исключением интервала $x_0 \pm b$. Как только частица обнаружена, мы прерываем опыт. Примем во внимание лишь те случаи, когда полное обследование всей оси, за исключением интервала $x_0 \pm b$, показывает, что нигде нет ни одной частицы, т. е. исключены все траектории, проходящие за пределами интервала $x_0 \pm b$. Схема эксперимента приведена на фиг. 3.3. Амплитуду теперь можно написать в виде

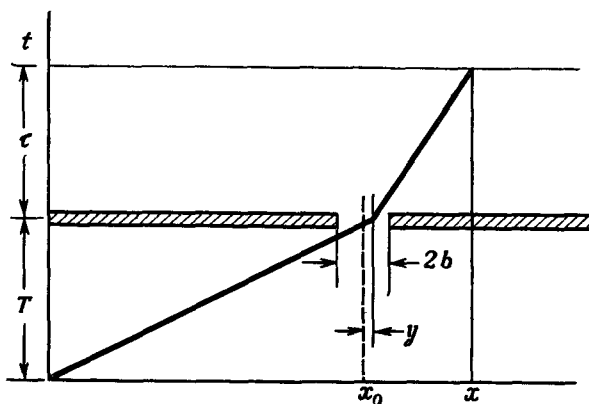
$$\psi(x) = \int_{-b}^b K(x + x_0, T + \tau; x_0 + y, T) K(x_0 + y, T; 0, 0) dy. \quad (3.19)$$

Это выражение записано в соответствии с правилом сложения амплитуд для последовательных во времени событий. Событие первое — частица движется от начала координат до щели. Событие второе — дальнейшее движение частицы от щели до точки x . Щель имеет конечную ширину, и прохождение через каждую ее точку связано с различными альтернативными возможностями; поэтому мы должны интегрировать по всей ширине щели. Частицы, которые минуют эту щель, выбывают из эксперимента, и их амплитуды в сумму не войдут. Все частицы, которые проходят через щель, движутся как свободные, и соответствующие им ядра задаются выражением (3.3). Амплитуда вероятности имеет,

таким образом, вид

$$\psi(x) = \int_{-b}^b \left(\frac{2\pi i \hbar \tau}{m} \right)^{-1/2} \left\{ \exp \left[\frac{im(x-y)^2}{2\hbar \tau} \right] \right\} \left(\frac{2\pi i \hbar T}{m} \right)^{-1/2} \times \\ \times \left\{ \exp \left[\frac{im(x_0+y)^2}{2\hbar T} \right] \right\} dy. \quad (3.20)$$

Этот интеграл можно выразить через интегралы Френеля. В таком представлении уже содержатся физические результаты (которые мы обсудим ниже), но они не наглядны из-за математической сложности интегралов Френеля. Чтобы не затемнять



Ф и г. 3.3. Движение частицы сквозь щель.

Известно, что частица, выходящая в момент времени $t = 0$ из точки $x = 0$, проходит между точками $x_0 - b$ и $x_0 + b$ в момент времени $t = T$.

Мы хотим вычислить вероятность нахождения частицы в некоторой точке x спустя время τ , т. е. когда $t = T + \tau$. Согласно классическим законам, частица должна находиться между $x_0(\tau/T) + b(1 + \tau/T)$ и $x_0(\tau/T) - b(1 + \tau/T)$, т. е. внутри ортогональной проекции щели. Однако квантовомеханические законы показывают, что частица может с отличной от нуля вероятностью находиться и вне этих классических пределов.

Эту задачу нельзя решать, применяя лишь закон движения для свободной частицы, так как щель ограничивает движение частицы. Поэтому разобьем задачу на две — соответственно двум последовательным движениям свободной частицы: в первой задаче рассматривается движение частицы из точки $x = 0$ при $t = 0$ в точку $x = x_0 + y$ при $t = T$, где $|y| \leq b$; во второй — движение из точки $x_0 + y$ при $t = T$ в точку x при $t = T + \tau$. Полная амплитуда вероятности, как это видно из формулы (3.19), равна интегралу от произведения ядер для двух таких движений свободной частицы.

математикой физический смысл результатов, мы получим другую, но аналогичную формулу, которая приведет нас к более простым математическим выражениям.

Гауссова щель. Введем в подынтегральное выражение в качестве вспомогательного множителя функцию $G(y)$. Если положить эту функцию равной единице в интервале $-b \leq y \leq +b$ и рав-

ной нулю всюду вне его, то пределы интегрирования можно раздвинуть до бесконечности без изменения результата. Тогда

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{mG(y)}{2\pi i \hbar \sqrt{\tau T}} \left(\exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left[\frac{(x-y)^2}{\tau} + \frac{(x_0+y)^2}{T} \right] \right\} \right) dy, \quad (3.21)$$

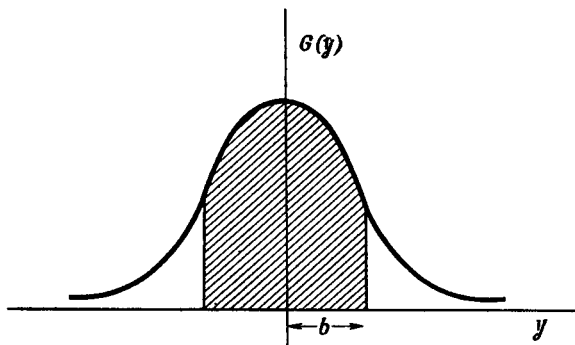
где

$$G(y) = \begin{cases} 1 & \text{для } -b \leq y \leq b, \\ 0 & \text{для } |y| > b. \end{cases}$$

Допустим теперь, что в качестве $G(y)$ взята функция Гаусса

$$G(y) = e^{-y^2/2b^2}. \quad (3.22)$$

Эта функция имеет вид, указанный на фиг. 3.4; эффективная ширина кривой связана с параметром b . Для такой функции приблизительно две трети всей площади под ней лежат между точками $-b$ и $+b$.



Ф и г. 3.4. Вид гауссовой функции $G(y) = e^{-y^2/2b^2}$.

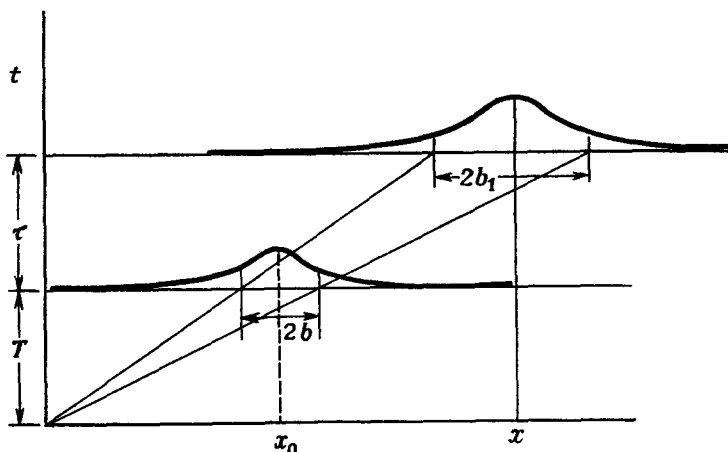
Форма кривой та же самая, что и у нормального распределения со стандартным отклонением, равным b .

Мы не знаем, каким образом можно было бы технически осуществить такую гауссову щель для реализации нашего мысленного эксперимента. Однако здесь нет принципиальной трудности: просто налицо ситуация, когда в момент времени T частицы распределены вдоль оси x с относительной амплитудой вероятности, пропорциональной функции $G(y)$ (относительная вероятность пропорциональна $[G(y)]^2$). Если бы частицы двигались классическим образом, то мы ожидали бы, что по истечении времени τ они будут распределены вдоль оси x так же, как и раньше, но с новым центром распределения на расстоянии x_1 от точки x_0

и с большей шириной b_1 , определяемыми равенствами

$$x_1 = \left(\frac{x_0}{T}\right) \tau, \quad b_1 = b \left(1 + \frac{\tau}{T}\right), \quad (3.23)$$

как показано на фиг. 3.5.



Ф и г. 3.5. Траектории частиц, движущихся сквозь гауссову щель.

Если частицы подчиняются классическим законам движения, то их распределение в момент времени $T + \tau$ будет иметь тот же самый вид, что и в момент времени T . Различие состояло бы только в величине уширения, пропорционального времени пролёта частиц. Характеристическая ширина распределения (т. е. ширина на половине высоты пика. — *Ред.*) будет возрастать от значения $2b$ до $2b_1$, где $b_1 = b(T + \tau)/T$. В действительности ширина в случае квантовомеханического движения будет больше указанной.

В случае такой гауссовой щели выражением для амплитуды будет

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m}{2\pi i \hbar \sqrt{\tau T}} \left\{ \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{x^2}{\tau} + \frac{x_0^2}{T} \right) + \frac{im}{\hbar} \left(-\frac{x}{\tau} + \frac{x_0}{T} \right) y + \left(\frac{im}{2\hbar\tau} + \frac{im}{2\hbar T} - \frac{1}{2b^2} \right) y^2 \right] \right\} dy. \quad (3.24)$$

Этот интеграл, подынтегральная функция которого имеет вид $\exp(\alpha x^2 + \beta x)$, можно вычислить, дополняя показатель экспоненты до полного квадрата:

$$\int_{-\infty}^{\infty} [\exp(\alpha x^2 + \beta x)] dx = \sqrt{\frac{\pi}{-\alpha}} \exp \left(-\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) \text{ для } \operatorname{Re}(\alpha) \leq 0. \quad (3.25)$$

Таким образом, амплитуда становится равной

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} \left[T\tau \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\tau} + \frac{\hbar i}{b^2 m} \right) \right]^{-1/2} \times \\ \times \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{x^2}{\tau} + \frac{x_0^2}{T} \right) - \frac{(im/\hbar)^2 (-x/\tau + x_0/T)^2}{4(im/2\hbar)(1/\tau + 1/T + \hbar i/b^2 m)} \right]. \quad (3.26)$$

Классическая скорость при движении от начала координат до центра щели есть $v_0 = x_0/T$. Подставив это в последнее равенство и сгруппировав некоторые члены, получим следующее выражение для амплитуды:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} \left(T + \tau + T\tau \frac{\hbar i}{mb^2} \right)^{-1/2} \times \\ \times \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \left(v_0^2 T + \frac{x^2}{\tau} \right) + \frac{(m^2/2\hbar^2 \tau^2) (x - v_0 \tau)^2}{(m/\hbar)(i/T + i/\tau - 1/b^2)} \right]. \quad (3.27)$$

Рассмотрим сначала относительную вероятность достижения частицей различных точек оси x . Эта вероятность пропорциональна квадрату модуля амплитуды. Заметим, что модуль экспоненты с мнимым показателем равен единице. Выделяя действительные части во втором сомножителе и в показателе последней экспоненты выражения (3.27), получаем

$$P(x) dx = \frac{m}{2\pi \hbar T} \frac{b}{\Delta x} \exp \left[-\frac{(x - v_0 \tau)^2}{(\Delta x)^2} \right] dx. \quad (3.28)$$

Здесь применялась подстановка

$$(\Delta x)^2 = b^2 \left(1 + \frac{\tau}{T} \right)^2 + \frac{\tau^2 \hbar^2}{m^2 b^2} = b_1^2 + \frac{\tau^2 \hbar^2}{m^2 b^2}. \quad (3.29)$$

Как мы и ожидали, распределение оказывается гауссовым с центром в точке $x_1 = v_0 \tau$, определяемой соотношением (3.23), однако ширина распределения Δx больше той величины b_1 , которая следует из этого соотношения. Интерпретировать это можно следующим образом. Пусть a_1 и a_2 — две независимые величины и их среднеквадратичные отклонения от средних значений составляют соответственно α_1 и α_2 . Тогда если $a_3 = a_1 + a_2$, то среднеквадратичное отклонение величины a_3 от ее среднего значения равно $\alpha_3 = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{1/2}$. Далее, для какого-либо распределения среднеквадратичное отклонение является мерой его протяженности, или шириной этого распределения, и для гауссова распределения $\exp(-x_1^2/2b^2)$ величина среднеквадратичного отклонения действительно равна b .

Таким образом, мы видим, что в данном случае квантово-механическая система ведет себя так, как если бы она обладала дополнительной случайной переменной x_1 , среднеквадратичное

отклонение которой составляет

$$\Delta x_1 = \frac{\hbar \tau}{mb}. \quad (3.30)$$

Физический смысл имеет именно это дополнительное уширение Δx_1 , а не сама переменная x_1 . Поскольку в этом члене появляется константа $\hbar$, ясно, что по природе своей он — квантовомеханический. Такой член является существенным в случае узких щелей и частиц с малой массой.

Итак, квантовая механика говорит нам, что после прохождения малых частиц сквозь узкую щель возникает неопределенность в их последующем положении. Эта неопределенность Δx_1 пропорциональна интервалу времени τ между прохождением частицы сквозь щель и последующим наблюдением ее положения. Вводя классическое понятие скорости, мы должны сказать, что прохождение частицы сквозь щель создает в значении ее скорости неопределенность, величина которой равна

$$\delta v = \frac{\hbar}{mb}. \quad (3.31)$$

Связанный с шириной щели параметр $2b$ мы могли бы рассматривать как меру неопределенности координаты частицы в момент ее прохождения сквозь щель. Если обозначить эту неопределенность через δx и записать произведение mv как импульс p , то выражение (3.31) приобретает вид

$$\delta p \delta x = 2\hbar. \quad (3.32)$$

Мы снова пришли к одной из формулировок принципа неопределенности: хотя в классическом смысле скорость могла быть известна точно, последующее положение частицы приобретает такую дополнительную неопределенность, как если бы частица при прохождении сквозь щель ширины δx получала случайный импульс δp . Если бы для качественного описания результатов квантовой механики использовались классические понятия, то мы бы сказали, что точное определение положения порождает неопределенность в импульсе.

Что за множитель появляется перед экспонентой в выражении (3.28)? Если проинтегрировать это выражение по всей области изменения x от $-\infty$ до $+\infty$, то в результате получим

$$P \text{ (для всех } x) = \frac{m}{2\pi\hbar T} b \sqrt{\pi}. \quad (3.33)$$

Эта величина есть, очевидно, вероятность того, что частица проходит сквозь щель, так как при интегрировании включаются те и только те частицы, которые действительно прошли сквозь

щель. Существует и другой способ получения этого результата. Предположим, что мы знаем квадрат модуля ядра $K(x_0 + y, T; 0, 0)$, составляющего вторую половину подынтегрального выражения (3.20). Это есть не что иное, как отнесенная к единице длины вероятность попадания частицы в точку щели $x_0 + y$

$$P(x_0 + y) dy = \frac{m}{2\pi\hbar T} dy. \quad (3.34)$$

Эта вероятность в пределах щели не зависит от координаты; следовательно, умножив ее на ширину этой щели, мы получили бы полную вероятность попадания частицы в щель. Это означает, что эффективная ширина гауссовой щели равна $b\sqrt{\pi}$. Если бы мы использовали первоначальную щель с резкими границами, то эффективная ширина получилась бы равной $2b$.

Задача 3.3. Возведя в квадрат амплитуду, заданную выражением (3.20), и интегрируя затем по x , покажите, что вероятность прохождения частицы сквозь нашу первоначальную щель

$$P(\text{пройти сквозь щель}) = \frac{m}{2\pi\hbar T} 2b. \quad (3.35)$$

В ходе решения этой задачи появится интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iax} dx, \quad (3.36)$$

который является интегральным представлением дираковской δ -функции $\delta(a)^1$.

Таким образом, квантовомеханические результаты согласуются с представлением о том, что вероятность прохождения частицы сквозь щель равна вероятности попадания этой частицы в щель.

Импульс и энергия. Убедимся теперь еще раз в том, что когда импульс частицы известен точно, соответствующая ей амплитуда изменяется как e^{ikx} . Для этого вернемся к подробному изучению амплитуды, заданной выражением (3.26). На этот раз попытаемся создать в нашем эксперименте такие условия, чтобы скорость частиц после прохождения щели была известна настолько точно, насколько это возможно.

Совершенно независимо от каких-либо квантовомеханических соображений существует классическая неопределенность ско-

¹) См. таблицы интегралов в приложении к этой книге и в [2].

рости порядка b/T . При любой заданной ширине щели, выбирая время T очень большим, можно сделать эту неопределенность пренебрежимо малой. Координату x_0 можно также взять настолько большой, чтобы при этом средняя скорость $x_0/T = v_0$ не обращалась в нуль. Считая v_0 и интервал времени τ постоянными, в пределе при $T \rightarrow \infty$ получаем следующее выражение для амплитуды:

$$\psi(x) \approx \frac{\text{const}}{\sqrt{1 + \tau \hbar / 2mb^2}} \exp \left[\frac{imx^2}{2\hbar\tau} + \frac{m^2(x - \tau v_0)^2}{4\hbar^2\tau^2(im/2\hbar\tau - 1/2b^2)} \right]. \quad (3.37)$$

Далее мы должны сделать так, чтобы квантовомеханическая неопределенность импульса $\hbar/b$ стала очень малой. Выберем для этого ширину щели настолько большой, чтобы величиной $1/b^2$ можно было пренебречь. Тогда амплитуда может быть записана в виде

$$\psi(x) \approx \text{const} \cdot \exp \left(\frac{imv_0}{\hbar} x - \frac{imv_0^2}{2\hbar} \tau \right). \quad (3.38)$$

Это весьма важный результат: если мы создали условия, при которых известно, что импульс частицы равен p , то амплитуда вероятности достижения ею точки x в момент времени t

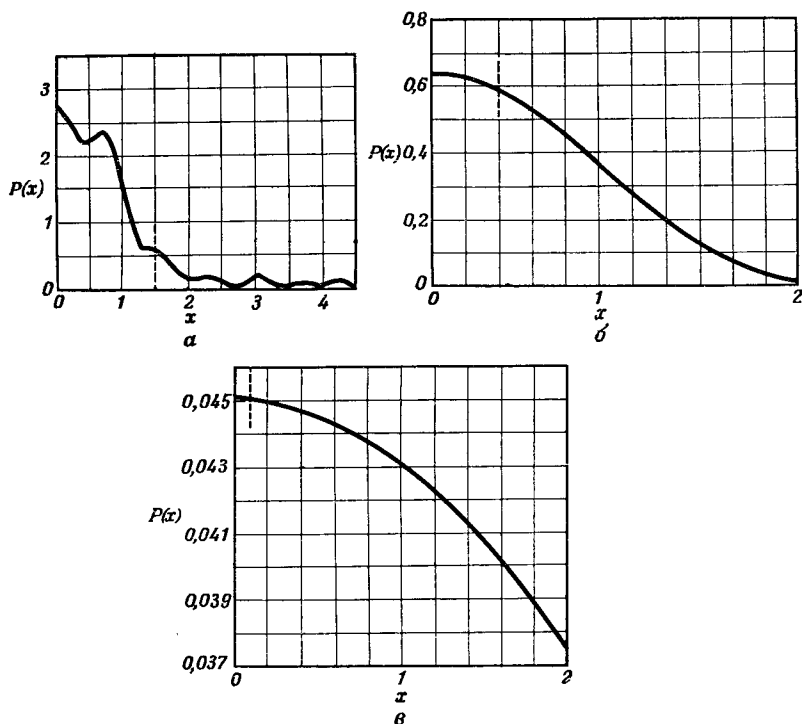
$$\psi(x) \approx \text{const} \cdot \exp \left(\frac{i}{\hbar} px - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right). \quad (3.39)$$

Мы видим, что это волна с определенным волновым числом $k = p/\hbar$. Кроме того, она имеет определенную частоту $\omega = p^2/2m\hbar$. Следовательно, можно утверждать, что в квантовой механике свободная частица с импульсом p обладает энергией, определяемой как произведение частоты на постоянную $\hbar$, которая, так же как и в классической механике, равна $p^2/2m$.

Вероятность попадания в какую-либо точку x , пропорциональная квадрату модуля соответствующей амплитуды, в этом случае оказывается не зависящей от x . Следовательно, точное знание скорости частицы означает, что о ее положении ничего не известно. При выполнении эксперимента, который дает нам точное значение скорости частицы, утрачивается возможность точного определения ее положения. Мы уже видели, что справедливо и обратное утверждение. Существование квантовомеханического уширения, обратно пропорционального ширине щели $2b$, означает, что точное знание положения частицы исключает всякие сведения о ее скорости. Таким образом, если вы знаете, где частица находится, то не можете сказать, как быстро она движется; если же вам известно, как быстро она движется, то нельзя сказать, где она. Это еще одна иллюстрация принципа неопределенности.

§ 3. Результаты в случае щели с резкими краями

От предельного случая вернемся теперь к случаю, когда ширина щели и квантовомеханическое уширение сравнимы по их величине, а времена и расстояния не слишком велики. Мы уже



Ф и г. 3.6. Распределение электронов после прохождения щелей с резкими краями и различной шириной.

В каждом случае вертикальной пунктирной линией показана предсказываемая классической теорией ширина распределения $b_1 = b(1 + \tau/T)$. Для отношения классической ширины распределения к квантовомеханическому уширению Δx_1 выбраны три различных значения: $b_1/\Delta x_1 = 15$ — кривая а; $b_1/\Delta x_1 = 1$ — кривая б; $b_1/\Delta x_1 = 1/15$ — кривая в. В каждом случае распределение простирается за границы классической ширины. Среднеквадратичная ширина распределения приблизительно пропорциональна величине $\Delta x = [(\Delta x_1)^2 + (b_1)^2]^{1/2}$.

видели, что гауссова щель приводит к гауссову распределению. Если использовать более реальную щель с резкими краями и вычислить возникающие интегралы Френеля, то распределение вероятности спустя время τ после прохождения щели подобно кривым, изображенным на фиг. 3.6.

Это распределение выражается формулой

$$P(x) dx = \frac{m}{2\pi\hbar(\tau+T)} \left\{ \frac{1}{2} [C(u_1) - C(u_2)]^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} [S(u_1) - S(u_2)]^2 \right\} dx, \quad (3.40)$$

где

$$u_1 = \frac{x - v_0 - b(1 + \tau/T)}{(\pi\hbar\tau/m)(1 + \tau/T)}, \quad u_2 = \frac{x - v_0 + b(1 + \tau/T)}{(\pi\hbar\tau/m)(1 + \tau/T)}, \quad (3.41)$$

а $C(u)$ и $S(u)$ — действительная и мнимая части интегралов Френеля. Первый множитель в этом распределении в точности совпадает с распределением вероятности для свободной частицы, задаваемым выражением (2.6). Остальная часть содержит некоторую комбинацию действительной и мнимой частей интегралов Френеля ¹⁾. Именно эта часть ответственна за многообразие кривых, изображенных на фиг. 3.6.

Таким образом, результаты для обеих щелей в общих чертах одинаковы. С наибольшей вероятностью частица находится внутри классической проекции щели. Все, что вне ее — результат квантовомеханического уширения.

Движение частицы сквозь щель рассматривалось нами так, как если бы оно состояло из двух отдельных движений: сначала частица движется к щели, а затем от щели до точки наблюдения. В области щели движение как бы расчленяется. Может возникнуть вопрос, как при таком «разделяющемся на части» движении частица «помнит» свою скорость и в основном сохраняет направление движения, предписываемое классической физикой? Или, другими словами, каким образом уменьшение ширины щели вызывает «потерю памяти», до тех пор пока в пределе все скорости частицы не станут равновероятными?

Чтобы понять это, исследуем амплитуду, описывающую движение к щели. Она в точности равна амплитуде вероятности для свободной частицы, определяемой выражением (3.3), где $x_a = t_a = 0$, $x_b = x_0 + y$ и $t_b = T$. При смещении поперек щели (меняется y) обе части амплитуды, действительная и мнимая, изменяются синусоидально. Как мы уже видели, длина волны этих синусоидальных колебаний тесно связана с импульсом [см. формулу (3.40)]. Последующее движение частицы является, как и в оптике, результатом интерференции этих волн. Эта интерференция конструктивна (т. е. усиливает волны) в основном направлении, предписываемом классической механикой, и, вообще говоря, деструктивна (т. е. гасит их) в других направлениях.

Если на ширине щели укладывается большое число волн, т. е. щель очень широкая, то в результате интерференции возникает

¹⁾ См. [3], стр. 125.— *Прим. ред.*

довольно острый пик и движение становится почти классическим. Предположим, однако, что щель сделана чрезвычайно узкой и на ее ширине не укладывается даже одна волна. Тогда не будет никаких осцилляций, которые приводили бы к интерференции, и информация о скорости частицы теряется. Поэтому в пределе, когда ширина щели стремится к нулю, все скорости частицы становятся равновероятными.

§ 4. Волновая функция

Мы уже построили амплитуду вероятности того, что частица достигнет некоторой определенной точки пространства и времени, тщательно прослеживая ее движение, в результате которого она попадает в эту точку. Однако часто бывает полезно рассматривать амплитуду перехода в точку пространства без всякого обсуждения предшествующего движения. Поэтому будем обозначать через $\psi(x, t)$ полную амплитуду вероятности перехода в точку (x, t) из некоторого (возможно, неопределенного) прошлого. Такая амплитуда обладает теми же самыми вероятностными свойствами, что и изученные уже нами амплитуды, т. е. вероятность найти частицу в точке x в момент времени t равна $|\psi(x, t)|^2$. Эту разновидность амплитуды будем называть волновой функцией. Различие между этой амплитудой и изученными ранее заключается лишь в способе обозначения. Каждому часто приходится слышать: система находится в «состоянии» ψ . Это лишь выражение другими словами того, что система описывается волновой функцией ψ .

Таким образом, ядро $K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \psi(x_2, t_2)$ фактически представляет собой волновую функцию. Это ядро есть амплитуда вероятности попасть в точку (x_2, t_2) . Запись $K(x_2, t_2; x_1, t_1)$ содержит больше информации, в частности, указывает, что эта амплитуда соответствует конкретному случаю, когда частица приходит из точки (x_1, t_1) . Возможно, для некоторых задач такая информация не представляет интереса, так что сохранять ее нет смысла. Тогда мы будем применять для волновой функции обозначение $\psi(x_2, t_2)$.

Так как волновая функция является амплитудой, она удовлетворяет правилам, по которым складываются амплитуды последовательных во времени событий. Так, поскольку соотношение (2.31) справедливо для любых точек (x_1, t_1) , волновая функция удовлетворяет интегральному уравнению

$$\psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_2, t_2; x_3, t_3) \psi(x_3, t_3) dx_3. \quad (3.42)$$

Этот результат можно сформулировать на физическом языке. Полная амплитуда перехода в точку (x_2, t_2) [т. е. $\psi(x_2, t_2)$] представляет собой сумму, или интеграл, по всем возможным значениям x_3 от произведения полной амплитуды перехода в точку (x_3, t_3) [т. е. $\psi(x_3, t_3)$] на амплитуду перехода из точки 3 в точку 2 [т. е. $K(x_2, t_2; x_3, t_3)$]. Это означает, что влияние всей предыдущей истории частицы может быть выражено всего лишь через одну функцию. Даже если бы мы забыли все, что знали о частице, кроме ее волновой функции в некоторый определенный момент времени, тем не менее могли бы предсказать все, что будет происходить с этой частицей в дальнейшем. Влияние всей предыдущей истории на будущее Вселенной могло бы быть получено из одной всеобъемлющей волновой функции.

Задача 3.4. Пусть в момент времени $t = 0$ свободная частица имеет некоторый определенный импульс [т. е. ее волновая функция равна $C \exp(ipx/\hbar)$]. Покажите с помощью соотношений (3.3) и (3.42), что в некоторый более поздний момент времени частица имеет тот же импульс [т. е. что волновая функция зависит от x через экспоненту $\exp(ipx/\hbar)$] и изменяется в зависимости от времени как $\exp[(-ip^2/2m\hbar)t]$. Это означает, что частица обладает определенной энергией $p^2/2m$.

Задача 3.5. Используя результаты решения задачи (3.2) и соотношение (3.42), покажите, что волновая функция удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (3.43)$$

которое является уравнением Шредингера для случая свободной частицы.

§ 5. Интегралы Гаусса

Мы закончили физическую часть данной главы и перейдем теперь к математическим вопросам. Введем дополнительный математический аппарат, который в некоторых случаях поможет нам вычислить сумму по траектории.

Наиболее простыми являются те интегралы по траекториям, в которых показатель экспоненты содержит переменные в степени не выше второй. Мы будем называть такие интегралы гауссовыми. В квантовой механике это соответствует случаю, когда действие S является квадратичной формой от траектории $x(t)$.

Чтобы проиллюстрировать, как действует в этом случае наш метод, рассмотрим частицу, лагранжиан которой имеет вид

$$L = a(t) \dot{x}^2 + b(t) \dot{x}x + c(t) x^2 + d(t) \dot{x} + e(t) x + f(t). \quad (3.44)$$

Действие представляет собой интеграл по времени от этой функции между двумя фиксированными конечными точками. Фактически лагранжиан в этой форме является несколько более общим, чем это необходимо. В тех членах, где множитель $\dot{x}$ входит линейно, он может быть исключен интегрированием по частям, однако это обстоятельство сейчас для нас несущественно. Мы хотим определить

$$K(b, a) = \int_a^b \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_a^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \right] \mathcal{D}x(t) \quad (3.45)$$

— интеграл по всем траекториям, соединяющим точки (x_a, t_a) и (x_b, t_b) .

Конечно, можно выполнить интегрирование по всем этим траекториям тем способом, который был описан вначале, т. е. путем разбиения области интегрирования на короткие временные интервалы и т. д. Пригодность этого способа для вычислений следует из того, что подынтегральное выражение представляет собой экспоненту от квадратичной формы переменных $\dot{x}$ и x . Такие интегралы всегда могут быть вычислены. Однако мы не будем проводить эти утомительные вычисления, так как наиболее важные характеристики ядра K можно определить следующим образом.

Пусть $\bar{x}(t)$ — классическая траектория между некоторыми фиксированными конечными точками. Это — путь, вдоль которого действие S экстремально. В обозначениях, которые мы применяли ранее,

$$S_{\text{кл}}[b, a] = S[\bar{x}(t)]. \quad (3.46)$$

Величину x можно выразить через $\bar{x}$ и новую переменную y

$$x = \bar{x} + y. \quad (3.47)$$

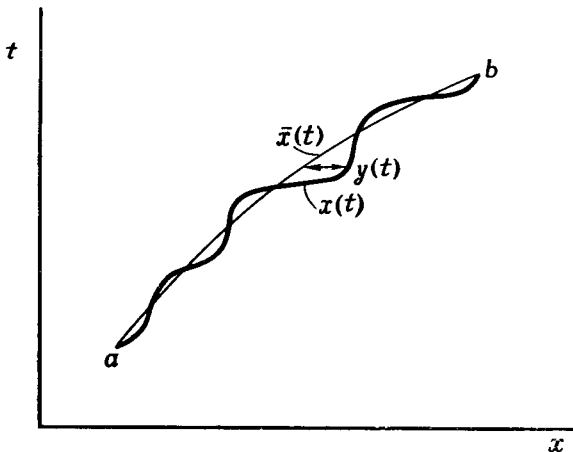
Это означает, что каждая точка на траектории определяется уже не ее расстоянием $x(t)$ от произвольной координатной оси, а отклонением $y(t)$ от классической траектории, как это показано на фиг. 3.7.

В каждый момент времени t переменные x и y различаются на постоянную величину $\bar{x}$ (конечно, для разных моментов времени эта постоянная различна). Поэтому $dx_i = dy_i$ для каждой выделенной точки t_i . В общем можно сказать, что $\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}y(t)$.

Интеграл действия можно записать в виде

$$S[x(t)] = S[\bar{x}(t) + y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} [a(t) (\dot{\bar{x}}^2 + 2\dot{\bar{x}}\dot{y} + \dot{y}^2) + \dots] dt. \quad (3.48)$$

Если сгруппировать все члены, не содержащие y , то в результате интегрирования получим $S[\bar{x}(t)] = S_{\text{кл}}$. Интеграл от суммы членов, пропорциональных первой степени y , равен нулю. Это может быть проверено непосредственным интегрированием (для этого требуется выполнить интегрирование по частям), однако такое вычисление не обязательно, так как мы уже знаем, что результат правилен. Действительно, функция $\bar{x}(t)$ выбрана



Ф и г. 3.7. Разность между классической траекторией $\bar{x}(t)$ и одной из альтернативных траекторий $x(t)$, описываемая функцией $y(t)$.

Поскольку обе эти траектории должны совпадать в начальной и конечной точках, то $y(t_a) = y(t_b) = 0$. Между этими крайними точками функция $y(t)$ может иметь любой вид. Так как классическая траектория полностью фиксирована, то любое изменение альтернативной траектории $x(t)$ эквивалентно соответствующей вариации разностной функции $y(t)$. Поэтому в интеграле по траекториям дифференциал $\mathcal{D}x(t)$ можно заменить на $\mathcal{D}y(t)$, а траекторию $x(t)$ — на $\bar{x}(t) + y(t)$.

При интегрировании по траекториям величина $\bar{x}(t)$ остается в этом случае постоянной. Кроме того, описывающая траекторию новая переменная $y(t)$ ограничена тем, что в крайних точках она равна нулю. Указанная подстановка приводит к интегралу по траекториям, не зависящему от положения крайних точек a и b .

таким образом, что вариации траектории в первом порядке вблизи $\bar{x}(t)$ не изменяют действие S . Все, что остается, имеет второй порядок по y и легко отделяется, так что можно написать

$$S[x(t)] = S_{\text{кл}}[b, a] + \int_{t_a}^{t_b} [a(t) \dot{y}^2 + b(t) \dot{y}y + c(t) y^2] dt. \quad (3.49)$$

Интеграл по траекториям не зависит от вида классической траектории, поэтому ядро можно представить в виде

$$K(b, a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\text{кл}}[b, a]\right) \times \\ \times \int_0^{t_b} \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [a(t) \dot{y}^2 + b(t) \dot{y}y + c(t) y^2] dt \right\} \right) \mathcal{D}y(t). \quad (3.50)$$

Так как в начальных и конечных точках всех траекторий $y = 0$, то интеграл по траекториям может быть представлен функцией только от моментов времени в конечных точках. Это означает, что ядро можно записать в виде

$$K(b, a) = e^{(i/\hbar) S_{\text{кл}}[b, a]} F(t_a, t_b), \quad (3.51)$$

т. е. оно определяется с точностью до функции, зависящей от t_a и t_b . В частности, его зависимость от пространственных переменных x_a и x_b оказывается полностью выясненной. Необходимо отметить, что зависимость ядра от коэффициентов при линейных членах $d(t)$ и $e(t)$ и от свободного члена $f(t)$ также полностью известна.

Такое положение представляется характерным для различных методов вычисления интегралов по траекториям; при помощи общих приемов могут быть получены многие результаты, однако оказывается, что часто не удается полностью определить экспоненциальный коэффициент. Он должен отыскиваться из других известных свойств решения, например посредством соотношения (2.31).

Интересно отметить, что приближенное выражение $K \sim \sim \exp(iS_{\text{кл}}/\hbar)$ является точным в случае, когда S представляет собой квадратичную форму.

Задача 3.6. Учитывая, что лагранжиан свободной частицы является квадратичной формой, покажите, что

$$K(b, a) = F(t_b, t_a) \exp \left[\frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right] \quad (3.52)$$

(см. задачу 2.1), и приведите соображения в пользу того, что функция F может зависеть только от разности $F = F(t_b - t_a)$.

Задача 3.7. Дальнейшая информация о функции F может быть получена на основе свойства, выраженного равенством (2.31). Прежде всего заметим, что результаты решения задачи 3.6 позволяют записать функцию $F(t_b - t_a)$ как $F(t)$, где t — интервал времени $(t_b - t_a)$. Используя это представление функции F в выражении (3.52) и подставляя последнее в равенство (2.31),

выразите функцию $F(t+s)$ через $F(t)$ и $F(s)$, где $t = t_b - t_c$ и $s = t_c - t_a$. Покажите, что если функцию F записать в виде

$$F(t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} f(t), \quad (3.53)$$

то новая функция $f(t)$ должна удовлетворять уравнению

$$f(t+s) = f(t) f(s). \quad (3.54)$$

Это означает, что $f(t)$ должна иметь вид

$$f(t) = e^{at}, \quad (3.55)$$

где a может быть комплексной величиной, т. е. $a = \alpha + i\beta$. Из изложенных до сих пор принципов трудно получить большую информацию о функции $f(t)$. Однако специальный выбор пормировочной константы A , как это указано в (2.21), означает, что в первом приближении по ε функция $f(\varepsilon) = 1$. Это соответствует тому, что величина a в выражении (3.55) полагается равной нулю. Окончательный вид функции $F(t)$ согласуется с выражением (3.3).

Из этого примера ясно, каким образом можно установить важные свойства интегралов по траекториям, даже если подынтегральные выражения являются весьма сложными функциями. Во всех случаях, когда подынтегральное выражение представляет собой экспоненциальную функцию, зависящую от траектории в степени не выше второго порядка, можно получить полное решение, исключая, может быть, лишь некоторые простые множители. Это остается верным независимо от числа переменных. Так, например, интеграл по траекториям вида

$$\int_a^b \int_c^d \dots \int_k^l \exp \{E[x(t), y(t), \dots, z(t)]\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}y(t) \dots \mathcal{D}z(t) \quad (3.56)$$

содержит в качестве определяющего сомножителя экспоненту $\exp(E_{\text{кл}})$, где $E_{\text{кл}}$ — экстремальное значение E , определяемое граничными условиями. Единственное ограничение состоит в том, что величина E является функцией второго порядка от переменных x, y и т. д. Остающийся сомножитель представляет собой функцию времени в конечных точках траекторий. Для большинства интегралов, которые мы будем изучать, наиболее существенная информация содержится в основном в экспоненциальном члене, а не в этом сомножителе, который в большинстве практических случаев нам даже не потребуется вычислять. Такой метод вычисления интегралов по траекториям будет часто использоваться в последующих главах.

§ 6. Движение в потенциальном поле

Простое применение наш метод находит в классическом пределе, когда действие S очень велико по сравнению с постоянной Планка $\hbar$. Как мы уже подчеркивали, ядро K в этом случае приблизительно пропорционально экспоненте $\exp(-iS_{\text{кл}}/\hbar)$. Мы можем теперь математически более строго рассмотреть обоснования такого приближения. Поскольку существенными являются лишь траектории, которые очень близки к классической траектории $\bar{x}$, сделаем подстановку $x = \bar{x} + y$. Тогда, если частица движется в потенциальном поле $V(x)$, мы можем записать

$$V(x) = V(\bar{x} + y) = V(\bar{x}) + yV'(\bar{x}) + \frac{y^2}{2}V''(\bar{x}) + \frac{y^3}{6}V'''(\bar{x}) + \dots, \quad (3.57)$$

где штрих обозначает дифференцирование по x и все производные вычисляются в точках классической траектории $\bar{x}$. Так как важны лишь малые значения y , будем предполагать, что V — достаточно гладкая функция, так что можно пренебречь членами порядка y^3 и выше. Это означает, что член y^3V''' и все члены более высокого порядка пренебрежимо малы по сравнению с удержанными членами.

В этом предположении подынтегральное выражение можно представить в виде квадратичной формы от y . Действительно, так как вдоль траектории $\bar{x}$ действие S экстремально, то

$$iS = S_{\text{кл}} + \text{члены второго порядка по } y.$$

Главный член в окончательном результате равен $\exp(iS_{\text{кл}}/\hbar)$, где $S_{\text{кл}}$ теперь, очевидно, содержит потенциал $V(\bar{x})$ в точках классической траектории. Остающийся интеграл по y берется от точки 0 до точки 0 и имеет тот же вид, что и последний множитель в выражении (3.50). Этот множитель является гладкой функцией, стоящей перед экспонентой $\exp(iS_{\text{кл}}/\hbar)$.

Полученный результат справедлив не только в классическом пределе, но и в других случаях. Предположим, например, что потенциал V — квадратичная функция x . Тогда решение является точным, поскольку разложение потенциала V в ряд (3.57) не содержит степеней выше второй. Некоторые примеры такого типа даны в задачах. В качестве другого примера предположим, что потенциал V — медленно меняющаяся функция. В частности, если третья и более высокие производные крайне малы, то приведенный выше результат является очень хорошим приближением. Этот частный случай в квантовой механике называется ВКБ-приближением¹⁾.

¹⁾ По именам физиков Вентцеля, Крамерса и Бриллюэна, исследовавших это приближение. — *Прим. ред.*

Существуют и другие случаи, когда рассматриваемое приближение оказывается хорошим. Предположим, что полное время движения очень мало. Если частица движется по траектории, сильно отличающейся от классической, то она должна иметь очень большую дополнительную скорость (чтобы за указанный интервал времени пройти расстояние от начальной до конечной точки). Добавочная кинетическая энергия пропорциональна квадрату этой большой скорости, а действие содержит член, грубо говоря, пропорциональный произведению кинетической энергии и интервала времени (т. е. пропорциональный квадрату скорости, умноженному на интервал времени). Действие вдоль таких траекторий будет очень большим, и фазы амплитуд вероятности для близлежащих траекторий будут сильно различаться. В этом случае в разложении потенциала V снова целесообразно отбросить члены более высокого порядка.

Задача 3.8. Лагранжиан гармонического осциллятора

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (3.58)$$

Покажите, что соответствующее ядро равно

$$K = F(T) \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} [(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b] \right\}, \quad (3.59)$$

где $T = t_b - t_a$ (см. задачу 2.2). Отметим, что вид функции $F(T)$ полностью не определяется. Его можно найти, исходя из других соображений; в случае гармонического осциллятора он равен

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2}. \quad (3.60)$$

Задача 3.9. Найдите ядро для частицы во внешнем постоянном поле f , где ее лагранжиан равен

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + fx. \quad (3.61)$$

Результат имеет вид

$$K = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(x_b - x_a)^2}{2T} + \frac{1}{2} fT (x_a + x_b) - \frac{fT^3}{24} \right] \right\}, \quad (3.62)$$

где $T = t_b - t_a$.

Задача 3.10. Лагранжиан для частицы с зарядом e и массой m в постоянном внешнем магнитном поле B , направленном по оси z ,

$$L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{eB}{2c} (xy - yx). \quad (3.63)$$

Покажите, что соответствующее ядро имеет вид

$$K = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{3/2} \frac{\omega T/2}{\sin \omega T/2} \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar} \left\{ \frac{(z_b - z_a)^2}{T} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\omega}{2} \operatorname{ctg} \frac{\omega T}{2} [(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2] + \omega (x_a y_b - x_b y_a) \right\} \right), \quad (3.64)$$

где $T = t_b - t_a$ и $\omega = eB/mc$.

Задача 3.11. Предположим, что гармонический осциллятор в задаче 3.8 возмущается внешней силой $f(t)$. Его лагранжиан

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 + f(t) x. \quad (3.65)$$

Покажите, что ядро определяется выражением

$$K = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{\text{кл}} \right),$$

где

$$S_{\text{кл}} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \left[(\cos \omega T) (x_b^2 + x_a^2) - 2x_b x_a + \right. \\ \left. + \frac{2x_b}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \sin \omega (t - t_a) dt + \frac{2x_a}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \sin \omega (t_b - t) dt - \right. \\ \left. - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^t f(t) f(s) \sin \omega (t_b - t) \sin \omega (s - t_a) ds dt \right] \quad (3.66)$$

и $T = t_b - t_a$.

Последний результат имеет большое значение для многих прикладных задач. В частности, он находит свое применение в квантовой электродинамике, так как электромагнитное поле может быть представлено в виде набора возмущаемых гармонических осцилляторов.

Задача 3.12. Если волновая функция гармонического осциллятора при $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (x - a)^2 \right], \quad (3.67)$$

то, используя соотношение (3.42) и результаты задачи 3.8, покажите, что

$$\psi(x, t) = \exp \left\{ -\frac{i\omega T}{2} - \frac{m\omega}{2\hbar} \left[x^2 - 2axe^{-i\omega T} + \frac{1}{2} a^2 (1 + e^{-2i\omega T}) \right] \right\}, \quad (3.68)$$

и найдите распределение вероятности $|\psi|^2$.

§ 7. Системы с многими переменными ¹⁾

Предположим, что система имеет несколько степеней свободы. Ядро, соответствующее такой системе, можно представить в виде (2.25), где символ $x(t)$ обозначает сейчас не одну, а сразу несколько координат.

В качестве первого примера мы рассмотрим трехмерное движение частицы, когда траектория определяется тремя функциями $x(t)$, $y(t)$ и $z(t)$. В частности, для свободной частицы действие равно

$$\frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} [\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2 + \dot{z}(t)^2] dt.$$

Ядро, описывающее переход из некоторой начальной точки (x_a, y_a, z_a) в момент времени t_a в конечную точку (x_b, y_b, z_b) и момент времени t_b ,

$$K(x_b, y_b, z_b, t_b; x_a, y_a, z_a, t_a) = \int_a^b \exp \left\{ \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) dt \right] \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}y(t) \mathcal{D}z(t). \quad (3.69)$$

Дифференциал здесь записан в виде $\mathcal{D}x(t) \mathcal{D}y(t) \mathcal{D}z(t)$. Если время разделено на промежутки ε , то положение частицы в момент времени t_i задается тремя переменными x_i, y_i, z_i и интеграл по переменным dx_i, dy_i, dz_i для каждого значения i имеет вид, аналогичный выражению (2.22). (Если представлять положение частицы вектором r в некотором s -мерном пространстве, то дифференциал в каждой точке равен элементу объема dv_i или $d^s r_i$ и произведение дифференциалов для каждого i мы можем записать в более общем виде $\mathcal{D}^s r_i$.)

Если используется определение (2.22), то в каждом временном интервале для каждой из переменных должен быть введен нормировочный множитель A [см. формулу (2.24)]. Поэтому если весь интервал времени разделен на N промежутков длительностью ε , то в интеграл должен быть включен множитель A^{-3N} .

Еще один пример ситуации с несколькими переменными дают две взаимодействующие системы. Предположим, что одна система представляет собой частицу массой m , координата которой x , а другая система — частицу массой M и с координатой X . Допустим, что эти две системы взаимодействуют посредством потен-

¹⁾ См. работу [4].

циала $V(x, X)$. Действие в этом случае равно

$$S[x(t), X(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{M}{2} \dot{X}^2 - V(x, X) \right] dt, \quad (3.70)$$

так что ядро имеет вид

$$\begin{aligned} K(x_b, X_b, t_b; x_a, X_a, t_a) = \\ = \int_a^b \int_a^b \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t), X(t)] \right\} \right) \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}X(t). \end{aligned} \quad (3.71)$$

Это обобщение соотношения (2.25) можно истолковать математически как движение точки в некотором абстрактном двумерном пространстве x, X . Однако значительно легче представлять это движение физически, рассматривая его как движение двух отдельных частиц, координаты которых соответственно x и X . Тогда K является ядром для перехода частицы массы m из пространственно-временной точки (x_a, t_a) в точку (x_b, t_b) и частицы массы M из точки (X_a, t_a) в точку (X_b, t_b) . Ядро K равно в этом случае сумме амплитуд вероятности, взятой по всем возможным траекториям обеих частиц между соответствующими конечными точками. Амплитуда вероятности, отвечающая какой-либо частной комбинации траекторий (т. е. определенным x и X), равна экспоненте $e^{iS/\hbar}$, где S — действие, определяемое выражением (3.70). С математической точки зрения амплитуда вероятности представляет собой функционал от двух независимых переменных x и X , и интеграл берется по обоим этим функциям.

§ 8. Системы с разделяющимися переменными

Допустим, что у нас имеются две частицы, которые движутся в одном или, быть может, нескольких измерениях. Пусть вектор x — совокупность координат одной частицы, а вектор X — совокупность координат другой (все, как и в предыдущем параграфе, с той лишь разницей, что описание переносится теперь на трехмерное пространство). Может оказаться, что полное действие разбивается на две части:

$$S[x, X] = S_x[x] + S_X[X], \quad (3.72)$$

где в S_x входят только траектории $x(t)$, а в S_X — только траектории $X(t)$. Это и есть тот случай, когда две частицы не взаимодействуют.

При этом ядро становится произведением двух сомножителей: одного, зависящего только от x , и другого, зависящего только

от X :

$$\begin{aligned}
 & K(x_b, X_b, t_b; x_a, X_a, t_a) = \\
 & = \int_a^b \int_a^b \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \{S_x[x] + S_X[X]\} \right\} \mathcal{D}^3x(t) \mathcal{D}^3X(t) = \right. \\
 & = \int_a^b \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_x[x] \right\} \right) \mathcal{D}x(t) \int_a^b \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_X[X] \right\} \right) \mathcal{D}X(t) = \\
 & = K_x(x_b, t_b; x_a, t_a) K_X(X_b, t_b; X_a, t_a). \quad (3.73)
 \end{aligned}$$

Ядро K_x здесь вычисляется так же, как если бы имелась только одна частица с координатой x , и аналогичным образом определяется ядро K_X . Таким образом, в случае двух независимых не взаимодействующих систем амплитуда вероятности события с участием обеих систем представляет собой произведение двух не связанных друг с другом ядер. Они-то и являются теми ядрами, которые указывают на вклад этих частиц в полное событие.

В случае нескольких частиц волновая функция $\psi(x, X, \dots, t)$ определяется прямо по аналогии с соответствующим ядром и интерпретируется как амплитуда вероятности того, что в момент времени t одна частица находится в точке x , другая — в точке X и т. д. Квадрат модуля этой волновой функции представляет собой вероятность того, что одна частица находится в точке x , другая — в точке X и т. д. Соотношение (3.42), справедливое в одномерном случае, можно сразу же обобщить:

$$\begin{aligned}
 \psi(x, X, \dots, t) = & \int \int K(x, X, \dots, t; x', X', \dots, t') \times \\
 & \times \psi(x', X', \dots, t') dx' dX', \quad (3.74)
 \end{aligned}$$

где dx' — произведение стольких дифференциалов, сколько координат имеет пространство x' .

Как уже упоминалось выше, в случае двух независимых частиц, описываемых совокупностями координат x и X , ядро K является произведением двух функций, одна из которых зависит от x и t , а другая же — от X и t . Тем не менее это вовсе не означает, что волновая функция ψ вообще есть такое произведение. В частном случае, когда в некоторый определенный момент времени ψ является произведением функции от x на функцию от X , т. е. $\psi = f(x) g(X)$, то она останется таковой и всегда. Поскольку ядро K описывает независимое движение двух частиц, то каждый сомножитель будет изменяться, как и в случае одной отдельной подсистемы. Однако это лишь особый случай. Независимость частиц в настоящий момент вовсе не означает, что они

всегда должны быть таковыми. В прошлом могло иметь место какое-то взаимодействие, которое приводило бы к тому, что функция ψ уже не будет простым произведением.

Если даже в первоначальной системе координат действие S и не оказывается простой суммой, то часто имеется некоторое преобразование (как, например, переход в систему центра масс и выделение внутренних координат), которое разделит переменные. Поскольку в квантовой механике действие используется в том же самом виде, что и в классической физике, то любое преобразование, разделяющее переменные в классической системе, разделит их и в соответствующей квантовомеханической системе. Таким образом, часть огромного аппарата классической физики можно непосредственно использовать и в квантовой механике. Такие преобразования очень важны, так как иметь дело с системой нескольких переменных трудно. Разделение переменных позволяет свести сложную задачу к ряду более простых.

§ 9. Интеграл по траекториям как функционал

Если задача описывается более чем одной переменной и если разделить эти переменные невозможно, то анализ обычно становится очень трудным. Ниже мы рассмотрим приближенные методы, применяемые в этом случае; сейчас же изложим один очень сильный метод, который иногда удается применить. Рассмотрим ядро, заданное выражением (3.71). Более подробно его можно записать как

$$K(b, a) = \int_a^b \int_a^b \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt + \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{M}{2} \dot{X}^2 dt + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, X, t) dt \right] \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}X(t). \quad (3.75)$$

Предположим, что мы сначала выполнили интегрирование по траекториям $X(t)$. Результат формально можно записать в виде

$$K(b, a) = \int_a^b \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right) \right] T[x(t)] \mathcal{D}x(t), \quad (3.76)$$

где

$$T[x(t)] = \int_a^b \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{M}{2} \dot{X}^2 + V(x, X, t) \right] \right\} \right) dt \mathcal{D}X(t). \quad (3.77)$$

Полученные выражения интерпретируются следующим образом. Интегрирование по всем траекториям, возможным для частицы X , дает функционал T . Функционал является числом и его величина зависит от вида всей функции. Например, ограниченная кривой площадь $A = \int f(y) dy$ является функционалом этой кривой. Для того чтобы найти эту площадь, необходимо задать функцию (кривую). Функционал мы записываем в виде $A[f(y)]$, чтобы показать, что A зависит от функции $f(y)$. Мы не пишем $A(f(y))$, поскольку под такой записью можно понимать функцию от функции, т. е. считать, что A зависит только от того, какое значение принимает f в некоторой определенной точке y . Это не тот случай. Величина $A[f(y)]$ зависит от вида всей функции $f(y)$, но не зависит непосредственно от y .

Функционал, определенный выражением (3.77), представляет собой амплитуду вероятности того, что под воздействием потенциала V из точки X_a в точку X_b переходит лишь одна частица X . При вычислении этот потенциал берется в предположении, что x фиксировано, в то время как X изменяется. Таким образом, это потенциал для частицы X , когда частица x движется вдоль некоторой определенной траектории. Ясно, что амплитуда T зависит от выбора траектории $x(t)$, поэтому мы и записываем ее в виде функционала от $x(t)$. Полную амплитуду мы получим, просуммировав функционал, состоящий из произведения амплитуды T на ядро, отвечающее свободной частице, по всем траекториям $x(t)$.

Таким образом, амплитуда K , как и все другие, представляет собой сумму амплитуд по всем возможным альтернативам. В свою очередь каждая из этих амплитуд является произведением двух: одной — отвечающей движению частицы X между заданными конечными точками, когда траектория $x(t)$ фиксирована, и другой — амплитуды вероятности того, что частица x движется именно по этой фиксированной траектории. Конечная сумма по всем альтернативам становится суммой по всем траекториям $x(t)$. Важно четко усвоить эту концепцию, так как она содержит в себе один из фундаментальных принципов квантовой электродинамики, изложение которой займет одну из последующих глав.

Разумеется, применять этот метод бесполезно, если нельзя никак — ни точно, ни приближенно — вычислить интеграл T для каждой из возможных траекторий $x(t)$. Как мы уже видели (см. задачу 3.11), в одном случае, а именно когда X — гармонический осциллятор, он вычисляется точно. Это очень важный в практическом отношении случай. Например, когда поле, с которым взаимодействует частица, квантуется, то оно представляет собой осциллятор.

§ 10. Взаимодействие частицы с гармоническим осциллятором

Рассмотрим теперь более подробно взаимодействие частицы с гармоническим осциллятором. Пусть $\mathbf{x}$ — это координаты частицы, а $\mathbf{X}$ — координаты осциллятора. Соответствующее действие может быть записано как

$$S[\mathbf{x}, \mathbf{X}] = S_0[\mathbf{x}] + \int_{t_a}^{t_b} g[\mathbf{x}(t), t] \mathbf{X}(t) dt + \int_{t_a}^{t_b} \frac{M}{2} (\dot{\mathbf{X}}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2) dt, \quad (3.78)$$

где S_0 — действие для частицы в отсутствие осциллятора. Ранее при обсуждении мы принимали, что это действие соответствует случаю свободной частицы. Однако такое предположение не является необходимым; движение частицы, описываемое координатами $\mathbf{x}$, может усложняться благодаря наличию потенциала. Так, например, действие могло бы иметь вид

$$S_0[\mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}, t) \right] dt. \quad (3.79)$$

Второй член в выражении (3.78) отвечает взаимодействию частицы и осциллятора. Заметим, что этот член линеен относительно $\mathbf{X}$. То, что мы пренебрегаем зависимостью от $\dot{\mathbf{X}}$, не означает какой-либо утраты общности рассмотрения, поскольку при наличии такого члена от него всегда можно избавиться интегрированием по частям. Коэффициент g назовем коэффициентом связи. Мы уже указывали на его зависимость от $\mathbf{x}(t)$, однако он может зависеть также и от других переменных, например от $\dot{\mathbf{x}}(t)$. Поскольку мы рассматриваем общий случай, точный вид этого коэффициента не существен. Последний член в выражении (3.78), очевидно, представляет собой действие для одного лишь осциллятора. Объединив его со вторым членом, мы можем записать функционал (3.77) как

$$T[\mathbf{x}(t)] = \int_a^b \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left\{ \frac{M}{2} (\dot{\mathbf{X}}^2 - \omega^2 \mathbf{X}^2) + g[\mathbf{x}(t), t] \mathbf{X}(t) \right\} dt \right) \right] \mathcal{D}\mathbf{X}(t). \quad (3.80)$$

Поскольку речь теперь идет об $\mathbf{X}$, ситуация становится подобной случаю возмущаемого гармонического осциллятора. Возмущающая сила есть некоторая определенная функция времени. Таким образом, это тот же самый интеграл по траекториям, кото-

рый рассмотрен в задаче 3.11, с той лишь разницей, что $f(t)$ заменено на $g[x(t), t]$, а начальные и конечные значения координат (x_b, x_a) — на (X_b, X_a) .

Для иллюстрации мы возьмем (имея в виду упростить выражение) частный случай, когда начальные и конечные значения координат осциллятора равны нулю: $X_b = X_a = 0$ (такое рассмотрение легко обобщается). Тогда, согласно результату задачи 3.11, имеем

$$T = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar m \omega \sin \omega T} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} g[\mathbf{x}(t), t] g[\mathbf{x}(s), s] \times \right. \\ \left. \times \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(s - t_a) ds dt \right\}. \quad (3.81)$$

Следовательно, ядро в данном случае может быть записано как

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega T} \right)^{1/2} \int_a^b \left(\exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} \dot{\mathbf{x}}(t)^2 dt - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{m\omega \sin \omega T} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} g[\mathbf{x}(t), t] g[\mathbf{x}(s), s] \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \sin \omega(t_a - t) \sin \omega(s - t_a) ds dt \right\} \right) \mathcal{D}\mathbf{x}(t). \quad (3.82)$$

В случае произвольных значений X_a, X_b выражение для K будет аналогичным, но более сложным.

Этот интеграл по траекториям сложнее любого из тех, с которыми мы до сих пор сталкивались, и продвинуться дальше в его вычислении невозможно до тех пор, пока мы не рассмотрим (в последующих главах) различные приближенные методы. Заметим лишь, что подынтегральное выражение по-прежнему можно записывать как $\exp[(i/\hbar)S]$, однако действие S теперь уже не является функцией только переменных $\mathbf{x}$, $\mathbf{x}$ и t ; оно содержит произведение величин, определяемых в два различных момента времени: s и t . Разделение на прошлое и будущее уже невозможно. Обусловлено это тем, что в некоторый предыдущий момент времени частица действует на осциллятор, который в дальнейшем сам воздействует на эту же частицу. Нельзя ввести никакую волновую функцию $\psi(\mathbf{x}, t)$, выражающую амплитуду вероятности того, что в момент времени t частица находится в заданной точке $\mathbf{x}$. Подобной амплитуды было бы недостаточно для предсказания будущего, поскольку для этого нужно знать также, что происходит с осциллятором в любой момент времени t .

§ 11. Вычисление интегралов по траекториям с помощью рядов Фурье

Рассмотрим интеграл по траекториям для случая гармонического осциллятора (см. задачу 3.8). Этот интеграл имеет вид

$$K(b, a) = \int_a^b \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt \right] \right\} \mathcal{D}x(t). \quad (3.83)$$

С помощью методов, изложенных в § 5, этот интеграл по траекториям, как и в задаче 3.8, можно свести к произведению двух функций. Наиболее важная из этих функций зависит от классической траектории гармонического осциллятора и содержится в формуле (3.59). Другая функция, зависящая только от временного интеграла, приведена в равенстве (3.60). Эту функцию можно записать как

$$F(T) = \int_0^T \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt \right] \right\} \mathcal{D}y(t). \quad (3.84)$$

Мы вычислим этот интеграл, во всяком случае, с точностью до множителя, не зависящего от ω , способом, который иллюстрирует еще одну возможность в обращении с интегралами по траекториям. Поскольку все траектории выходят из точки 0 в момент времени $t = 0$ и возвращаются в эту же точку в момент $t = T$, функцию $y(t)$ можно разложить в ряд Фурье по синусам с основной гармоникой, равной $2\pi/T$:

$$y(t) = \sum_n a_n \sin \frac{n\pi t}{T}. \quad (3.85)$$

Тогда вместо того, чтобы в каждый момент времени t рассматривать траектории как функции от y , мы можем считать их функциями коэффициентов a_n . Это есть линейное преобразование, якобиан которого J является постоянной величиной, не зависящей, очевидно, от ω , m и $\hbar$.

Конечно, этот якобиан можно вычислить непосредственно. Однако мы избежим здесь этого вычисления, собрав все множители, которые не зависят от ω (в том числе и J), в одну константу. Точное значение этой постоянной всегда можно найти, поскольку мы знаем ее значение $F(T) = \sqrt{m/2\pi i \hbar T}$ для $\omega = 0$ (случай свободной частицы).

Интеграл для действия может быть записан через ряды Фурье (3.85). Поэтому член, пропорциональный кинетической

энергии, становится равным

$$\begin{aligned} \int_0^T \dot{y}^2 dt &= \sum_n \sum_m \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T \cos \frac{n\pi t}{T} \cos \frac{m\pi t}{T} dt = \\ &= T \cdot \frac{1}{2} \sum_n \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2 \end{aligned} \quad (3.86)$$

и аналогично член, пропорциональный потенциальной энергии, становится равным

$$\int_0^T y^2 dt = T \cdot \frac{1}{2} \sum_n a_n^2. \quad (3.87)$$

Если предположить, что время T разделено на интервалы длины ε , как это указано в равенствах (2.19), так что имеется лишь конечное число N коэффициентов a_n , то интеграл по траекториям приобретает вид

$$\begin{aligned} F(T) &= J \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\exp \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{im}{2\hbar} \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} \right) \times \\ &\quad \times \frac{da_1}{A} \frac{da_2}{A} \dots \frac{da_N}{A}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Поскольку экспонента может быть разбита на сомножители, то можно порознь вычислить интеграл по каждому из коэффициентов a_n . В результате такого интегрирования получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2 \right] \right\} \frac{da_n}{A} = \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2}. \quad (3.89)$$

Таким образом, интеграл по траекториям пропорционален произведению

$$\prod_{n=1}^N \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2} = \prod_{n=1}^N \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} \right)^{-1/2} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2} \right)^{-1/2}. \quad (3.90)$$

Первое произведение справа не зависит от ω и объединяется с якобианом и другими сомножителями, которые мы собрали в одну постоянную. Второе произведение стремится к пределу $[(\sin \omega T)/\omega T]^{-1/2}$, когда $N \rightarrow \infty$, т. е. когда $\varepsilon \rightarrow 0$. Поэтому

$$F(T) = C \left(\frac{\sin \omega T}{\omega T} \right)^{-1/2}, \quad (3.91)$$

где постоянная C не зависит от ω . Но при $\omega = 0$ наш интеграл совпадает со случаем свободной частицы, для которого мы уже

нашли, что

$$F(T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2}. \quad (3.92)$$

Следовательно, для гармонического осциллятора имеем

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2}. \quad (3.93)$$

Это нужно подставить в формулу (3.59), чтобы получить полное решение.

Задача 3.13. Следя за всеми постоянными, покажите, что якобиан удовлетворяет соотношению

$$J \sqrt{N} \left(\frac{T}{\pi} \right)^N \prod_{n=1}^N \frac{1}{n} \rightarrow 1, \quad (3.94)$$

когда $N \rightarrow \infty$.

ШРЕДИНГЕРОВСКОЕ ОПИСАНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В интегралах по траекториям, которые мы до сих пор рассматривали, всюду [за исключением выражения (3.82)] под знаком интеграла стояли экспоненты от действия, обладающего свойством

$$S[2, 1] = S[2, 3] + S[3, 1]. \quad (4.1)$$

Такие интегралы можно исследовать с помощью интегральных уравнений, к которым они сводятся. Мы уже видели это в гл. 2 [см., например, выражение (2.34)] и в гл. 3 [выражение (3.42)].

Еще более удобным методом, когда это возможно, является сведение интеграла по траекториям к дифференциальному уравнению. Такая возможность в квантовой механике существует и фактически представляет собой самый удобный способ изложения этой теории. Почти всегда бывает легче решить дифференциальное уравнение, чем непосредственно вычислять интеграл по траекториям. Обычное изложение квантовой механики основано именно на таком дифференциальном уравнении, известном как уравнение Шредингера. В данной главе мы выведем это уравнение на основе нашей формулировки квантовой механики, но не будем рассматривать его решение для большого числа примеров, поскольку такие решения достаточно подробно рассмотрены в других книгах ¹⁾.

Заметим, что эта глава преследует двойную цель.

1. По отношению к читателю, который интересуется главным образом квантовой механикой, наша задача состоит в том, чтобы связать формулировку, основанную на интегралах по траекториям, с другими изложениями, встречающимися в научной литературе и учебниках, с тем чтобы читатель мог продолжить самостоятельное изучение предмета, научившись переходить с одного языка на другой и обратно.

2. Читателя, который интересуется в основном методом интегралов по траекториям, глава познакомит с техникой сведения

¹⁾ См., например, [2]. (Большое число поучительных примеров, связанных с решением уравнения Шредингера, имеется в книгах советских авторов: Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, нерелятивистская теория, М., 1963; Д. И. Блохинцев, Основы квантовой механики, М., 1962; А. А. Соколов, Ю. М., Лоскутов и И. М. Тернов, Квантовая механика, М., 1962, и многих других.— Прим. ред.)

определенного класса этих интегралов к дифференциальным уравнениям; такое сведение лучше всего показать на одном квантовомеханическом примере, к которому мы теперь и переходим.

§ 1. Уравнение Шредингера

Дифференциальная форма соотношений. Причина того, что мы можем перейти к дифференциальному уравнению, заключена в том, что соотношение (4.1) справедливо для любых точек 1, 2 и 3. Например, момент t_2 может отличаться от момента t_3 всего лишь на бесконечно малый интервал ε . Это позволяет нам связать значение интеграла по траекториям, вычисленное для одного момента, с его значением в другой момент, бесконечно близкий к первому. Таким путем мы можем получить для интеграла некоторое дифференциальное уравнение.

Как было уже показано, понятие волновой функции можно ввести как следствие соотношения (4.1). Более того, мы знаем, что выражение

$$\psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1 \quad (4.2)$$

описывает волновую функцию в момент времени t_2 через волновую функцию в момент времени t_1 . Чтобы получить искомое дифференциальное уравнение, применим это соотношение к специальному случаю, когда время t_2 отличается от времени t_1 всего лишь на бесконечно малую величину ε . Ядро K (2,1) пропорционально экспоненциальной функции от действия для интервала времени $(t_1 t_2)$, выраженного в единицах $i/\hbar$. Но для малого интервала ε действие приближенно равно произведению ε на значение лагранжиана в некоторой точке этого интервала. Следовательно, в том же приближении, что и для равенства (2.34), мы можем записать

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} \exp \left[\varepsilon \frac{i}{\hbar} L \left(\frac{x-y}{\varepsilon}, \frac{x+y}{2} \right) \right] \psi(y, t) dy. \quad (4.3)$$

Применим теперь это выражение к частному случаю одномерного движения частицы под воздействием потенциала $V(x, t)$, т. е. к случаю, когда $L = (m\dot{x}^2/2) - V(x, t)$. Соотношение (4.3) тогда запишется в виде

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \varepsilon) = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{2\varepsilon} \right] \right\} \times \\ & \times \left\{ \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V \left(\frac{x+y}{2}, t \right) \right] \right\} \psi(y, t) dy. \end{aligned} \quad (4.4)$$

В показателе первой экспоненты появляется величина $(x - y)^2/\varepsilon$. Ясно, что если y заметно отличается от x , то эта величина очень велика и, следовательно, при изменении y экспонента быстро осциллирует. Область осцилляций первого сомножителя дает очень малый вклад в интеграл (вследствие слабого изменения всех других величин). Существенный вклад дают лишь значения y , близкие к x , когда экспонента изменяется более медленно. На этом основании сделаем подстановку $y = x + \eta$, имея в виду, что заметные вклады в интеграл будут получаться лишь при малых η . После подстановки получаем

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(x + \frac{\eta}{2}, t\right)\right] \psi[(x + \eta), t] d\eta. \quad (4.5)$$

Фаза первой экспоненты изменяется примерно на радиан, когда η порядка $\sqrt{\varepsilon\hbar/m}$, так что наибольший вклад в интеграл получится в области именно таких значений η .

Функцию ψ мы можем разложить в степенной ряд, причем необходимо удержать лишь члены порядка ε . Это обеспечивает сохранение членов второго порядка по η . Величину $\varepsilon V[(x + \eta/2), t]$ можно замесить на $\varepsilon V(x, t)$, поскольку возникающие при этом ошибки более высокого порядка малости, чем ε . Ограничиваясь в левой части соотношения (4.5) первым порядком по ε , а в правой — первым порядком по ε и вторым по η , получаем

$$\begin{aligned} \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon} \left[1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x, t)\right] \times \\ &\times \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right] d\eta. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Если в правой части удержать лишь основной член, то получим произведение функции $\psi(x, t)$ на интеграл

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon} d\eta = \frac{1}{A} \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2}; \quad (4.7)$$

в левой же части мы имеем только $\psi(x, t)$. Для того чтобы обе части равенства (4.6) совпадали в пределе при ε , стремящемся к нулю, необходимо выбрать A таким образом, чтобы выражение (4.7) равнялось единице. Отсюда следует

$$A = \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2}, \quad (4.8)$$

что мы видели и ранее [см. формулу (2.21)]. Таким способом величину A можно определять и в более сложных задачах. Значение A должно выбираться так, чтобы равенство (4.6) выполнялось с точностью до членов нулевого порядка по ε . В противном случае при $\varepsilon \rightarrow 0$ предел исходного интеграла по траекториям не будет существовать.

Для вычисления правой части равенства (4.6) мы должны использовать два интеграла:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon} d\eta = 0 \quad (4.9)$$

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon} \eta^2 d\eta = \frac{i\hbar\varepsilon}{m}. \quad (4.10)$$

Подставив в формулу (4.6) значения этих интегралов, получим

$$\psi + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V\psi - \frac{\hbar\varepsilon}{2im} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (4.11)$$

Последнее равенство будет выполняться с точностью до ε , если функция ψ удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t) \psi. \quad (4.12)$$

Это и есть уравнение Шредингера для нашей задачи о движении частицы в одном измерении. Соответствующие уравнения для более сложных случаев можно составлять так же, как это сделано в рассмотренных ниже задачах.

Задача 4.1. Покажите, что для трехмерного движения частицы во внешнем поле с потенциалом V уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi. \quad (4.13)$$

Это уравнение, впервые записанное Шредингером в 1925 г., определило центральное направление всего последующего развития квантовой механики.

Операторная форма уравнения Шредингера. Все уравнения, получаемые (соответственно различным видам лагранжиана) при решении разных задач, можно для удобства записать в виде

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (4.14)$$

Символ H здесь не является числом, а указывает на операцию, которую необходимо совершить над функцией ψ . Этот символ называется оператором Гамильтона. Например, для уравнения (4.12)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V. \quad (4.15)$$

Такое операторное соотношение означает, что если под каждый оператор в обеих частях равенства подставить одну и ту же (любую) функцию f , то образуется полное уравнение для этой функции. Таким образом, соотношение (4.15) символически утверждает, что уравнение

$$Hf = -\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + Vf \quad (4.16)$$

справедливо для любой функции f .

Задача 4.2. Лагранжиан заряженной частицы в магнитном поле равен

$$L = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{e}{c} \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A} - e\varphi, \quad (4.17)$$

где $\dot{\mathbf{r}}$ — вектор скорости, e — заряд, c — скорость света, $\mathbf{A}$ и φ — векторный и скалярный потенциалы. Покажите, что соответствующее уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi + e\varphi \psi. \quad (4.18)$$

Следовательно, в этом случае гамильтониан равен

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + e\varphi. \quad (4.19)$$

Задача 4.3. Покажите, что комплексно-сопряженная функция ψ^* (которая получается, если в функции ψ изменить знак всех i) удовлетворяет уравнению

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (H\psi)^*. \quad (4.20)$$

Смысл понятия «оператор» станет яснее из следующих примеров. Например, оператор x означает умножение на x , оператор x^2 — умножение на x^2 , оператор $V(x)$ (некоторая функция от x) — умножение на $V(x)$, оператор $\partial/\partial x$ — частное дифференцирование по x и т. д.

Если A и B являются операторами, то оператор AB означает, что мы должны сначала применить оператор B и затем уже оператор A , т. е. $AB\psi \equiv A(B\psi)$. Поэтому, например, оператор

$x (\partial/\partial x)$ означает умножение x на $\partial\psi/\partial x$. С другой стороны, $(\partial/\partial x)x$ означает частную производную по x от функции $x\psi$, или $(\partial/\partial x)(x\psi) = x (\partial\psi/\partial x) + \psi$. Мы видим, что операторы AB и BA , вообще говоря, не тождественны. Оператор $A + B$ определим так, чтобы действие $A + B$ на функцию ψ давало функцию $A\psi + B\psi$. Например, предыдущее соотношение можно следующим образом записать в виде уравнения операторов:

$$\frac{\partial}{\partial x} x = x \frac{\partial}{\partial x} + 1. \quad (4.21)$$

Это означает, что соотношение $(\partial/\partial x)xf = x(\partial/\partial x)f + f$ выполняется для любой функции f .

Задача 4.4. Покажите, что

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} x = x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.22)$$

и, следовательно, определенный формулой (4.15) оператор H будет удовлетворять соотношению

$$Hx - xH = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (4.23)$$

Такая операторная запись очень широко применяется в общепринятых формулировках квантовой механики.

Уравнение Шредингера для ядра. Поскольку ядро $K(2, 1)$, рассматриваемое как функция координат точки 2, представляет собой частный вид волновой функции (а именно волновую функцию частицы, исходящей из точки 1), оно тоже должно удовлетворять уравнению Шредингера. Поэтому в случае, соответствующем равенству (4.15), получаем

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t_2} K(2, 1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} K(2, 1) + V(2) K(2, 1) \quad (\text{если } t_2 > t_1), \quad (4.24)$$

а в общем случае имеем для $t_2 > t_1$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial K(2, 1)}{\partial x_2} - H_2 K(2, 1) = 0, \quad (4.25)$$

где оператор H_2 действует только на координаты точки 2.

Задача 4.5. Используя соотношение

$$K(2, 1) = \int_{-\infty}^{\infty} K(2, 3) K(3, 1) dx_3 \quad (4.26)$$

(где $t_3 - t_1 = \varepsilon$ — бесконечно малая величина), покажите, что если $t_2 > t_1$, то ядро K удовлетворяет уравнению

$$+ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t_1} K(2, 1) - H_1^* K(2, 1) = 0, \quad (4.27)$$

где оператор H_1 действует только на координаты точки 1.

Функция $K(2, 1)$, если ее рассматривать как интеграл по траекториям, определена лишь для $t_2 > t_1$. Она остается неопределенной, если $t_2 < t_1$. Как мы увидим из дальнейшего, очень удобно положить $K(2, 1)$ для $t_2 < t_1$ равным нулю [в частности, соотношение (4.2) в этом случае будет справедливо только при $t_2 > t_1$]. Если

$$K(2, 1) = 0 \quad \text{для} \quad t_2 < t_1, \quad (4.28)$$

уравнение (4.25), очевидно, справедливо также и в области $t_2 < t_1$ (что является тривиальным, поскольку $K = 0$). Однако это уравнение не удовлетворяется в точке $t_2 = t_1$, так как функция $K(2, 1)$ при $t_2 = t_1$ терпит разрыв.

Задача 4.6. Покажите, что $K(2, 1) \rightarrow \delta(x_2 - x_1)$, когда $t_2 \rightarrow t_1 + 0$.

Из результата задачи 4.6 мы видим, что дифференцирование ядра K по переменной t_2 дает δ -функцию времени, умноженную на $\delta(x_2 - x_1)$ — производную от ступенчатой функции. Следовательно, ядро K удовлетворяет уравнению

$$- \frac{\hbar}{i} \frac{\partial K(2, 1)}{\partial t_2} - H_2 K(2, 1) = - \frac{\hbar}{i} \delta(x_2 - x_1) \delta(t_2 - t_1). \quad (4.29)$$

Вместе с граничным условием (4.28) это уравнение могло бы служить определением функции $K(2, 1)$, если уравнение Шредингера рассматривать в качестве основы квантовой механики. Величина $K(2, 1)$, очевидно, является одной из разновидностей функции Грина для уравнения Шредингера.

Сохранение вероятности. Определенный соотношением (4.15) оператор Гамильтона обладает интересным свойством: если f и g — две любые функции, которые обращаются в нуль на бесконечности, то

$$\int_{-\infty}^{\infty} (Hg)^* f dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^* (Hf) dx. \quad (4.30)$$

Такая символическая запись означает следующее. В левой части этого равенства мы должны, взяв функцию g , подействовать на нее оператором H , получить Hg и проделать комплексное сопря-

жение. Полученный результат умножается затем на f и интегрируется по всему пространству. Если же образовать величину Hf , умножить ее на функцию, комплексно-сопряженную g , и проинтегрировать в тех же пределах, получится тот же самый результат. Легко проверить, что это будет именно так, если вычислить выражение $\int (Hg)^* f dx$ (по частям, где это необходимо).

Если в левую часть тождества (4.30) подставить рассмотренный выше оператор (4.15), то получим

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 g^*}{dx^2} f dx + \int_{-\infty}^{\infty} V g^* f dx = \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{dg^*}{dx} f - g^* \frac{df}{dx} \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} g^* \frac{d^2 f}{dx^2} dx + \int_{-\infty}^{\infty} V g^* f dx \quad (4.31) \end{aligned}$$

(здесь дважды выполнено интегрирование по частям). Если функции f и g на бесконечности обращаются в нуль, то проинтегрированные члены исчезают и равенство (4.30) доказано. Оператор, обладающий свойством (4.30), называется эрмитовым. Гамильтониан в квантовой механике всегда эрмитов. В более общих случаях, чем рассмотренный выше, интегрирование по одной переменной заменяется интегрированием (или суммированием) по всем переменным системы.

Положив функции f и g равными $\psi(x, t)$, получим

$$\int (H\psi)^* \psi dx = \int \psi^* (H\psi) dx, \quad (4.32)$$

и если функция ψ удовлетворяет волновому уравнению (4.14), то это выражение можно записать как

$$\int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dx + \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx = \frac{d}{dt} \left(\int \psi^* \psi dx \right) = 0. \quad (4.33)$$

Отсюда видно, что величина $\int \psi^* \psi dx$ не зависит от времени. Это легко интерпретировать. Если функция ψ соответствующим образом нормирована, то $\psi^* \psi$ выражает вероятность найти систему в точке x , поэтому интеграл от $\psi^* \psi$ равен вероятности вообще обнаружить систему в какой-либо точке пространства. Это вероятность вполне достоверного события, и потому она постоянна и равна единице. Конечно, насколько это касается волнового уравнения, функция ψ может быть умножена на любую постоянную и по-прежнему останется его решением. Квадрат этой константы войдет в произведение $\psi^* \psi$, и именно ему будет теперь равняться значение интеграла.

В нашем толковании функции ψ как амплитуды вероятности равенство интеграла от $\psi^* \psi$ константе является совершенно фундаментальным. На языке функций K это означает, что в момент времени t_2 интеграл от квадрата модуля волновой функции имеет ту же самую величину, что и в момент времени t_1 , т. е. если

$$\psi(2) = \int K(2, 1) f(1) dx_1, \quad (4.34)$$

то

$$\int \psi^*(2) \psi(2) dx_2 = \int f^*(1) f(1) dx_1, \quad (4.35)$$

или

$$\begin{aligned} \int \int \int K^*(2; x'_1, t_1) K(2; x_1, t_1) f^*(x'_1) f(x_1) dx_1 dx'_1 dx_2 = \\ = \int f^*(x_1) f(x_1) dx_1. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Так как это должно выполняться для любой функции f , то

$$\int K^*(2; x'_1, t_1) K(2; x_1, t_1) dx_2 = \delta(x'_1 - x_1). \quad (4.37)$$

Следовательно, для того чтобы можно было интерпретировать функцию ψ как амплитуду вероятности, необходимо, чтобы ядро K удовлетворяло соотношению (4.37). Мы получили это, исходя из уравнения Шредингера. Было бы приятнее вывести это соотношение и другие свойства, такие, как (4.38) и результат задачи (4.7), прямо на основе определения ядра K как интеграла по траекториям и не переходить к дифференциальному уравнению. Это, конечно, можно сделать, однако в этом случае вывод не будет столь простым и изящным, каким он должен быть для таких важных соотношений. Справедливость (4.37) можно проверить следующим образом: для малого интервала, когда $t_1 = t_2 - \varepsilon$, оно непосредственно следует из выражения $\exp(i\varepsilon L/\hbar)$. Методом индукции соотношение (4.37) можно далее обобщить для любого интервала. Один из недостатков подхода к квантовой механике, основанного на интегралах по траекториям, состоит в том, что соотношения, включающие такие сопряженные величины, как ψ^* или K^* , не очевидны сами по себе.

Умножая обе части выражения (4.37) на функцию $K(1, 3)$ и интегрируя по переменной x_1 , можно показать, что для $t_2 > t_1 > t_3$

$$\int K^*(2, 1) K(2, 3) dx_2 = K(1, 3). \quad (4.38)$$

Сравним это с равенством

$$\int K(1, 2) K(2, 3) dx_2 = K(1, 3),$$

где $t_1 > t_2 > t_3$. Последнее равенство мы можем истолковать следующим образом: если за исходную взята точка t_3 , то $K(2,3)$ дает нам амплитуду вероятности для более позднего момента времени t_2 . Если мы хотим перейти к еще более позднему моменту времени t_1 , то это можно сделать, используя ядро $K(1,2)$. С другой стороны, если, зная амплитуду в момент времени t_2 , мы захотим *вернуться назад*, чтобы определить ее в более ранний момент времени $t_1 < t_2$, то это можно сделать, используя ядро $K^*(2,1)$ в соответствии с равенством (4.38). Следовательно, можно сказать, что действие сопряженного ядра $K^*(2,1)$ компенсирует действие ядра $K(1,2)$.

Задача 4.7. Покажите, что если $t_1 < t_3$, то левая часть равенства (4.38) равна $K^*(3,1)$.

§ 2. Гамильтониан, не зависящий от времени

Стационарные состояния с определенной энергией. Специальный случай, когда гамильтониан H оказывается не зависящим от времени, очень важен в практическом отношении. Ему соответствует действие S , не зависящее явным образом от времени t (например, когда потенциалы A и V не содержат время t). В таком случае ядро зависит не от переменной времени t , а будет функцией лишь интервала $t_2 - t_1$. Вследствие этого факта возникают волновые функции с периодической зависимостью от времени.

Как это происходит, легче всего понять, если обратиться к дифференциальному уравнению. Попытаемся найти частное решение уравнения Шредингера (4.14) в виде $\psi = f(t) \phi(x)$, т. е. в виде произведения функции, зависящей только от времени, и функции, зависящей только от координат. Подстановка в уравнение (4.14) дает соотношение

$$-\frac{\hbar}{i} f'(t) \phi(x) = H f(t) \phi(x) = f(t) H \phi(x), \quad (4.39)$$

или

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{f'}{f} = \frac{1}{\phi} H \phi. \quad (4.40)$$

Левая часть этого уравнения не зависит от x , тогда как правая не содержит зависимости от t . Для того чтобы это уравнение удовлетворялось при любых x и t , обе его части не должны зависеть от этих переменных, т. е. должны быть постоянными. Обозначим такую постоянную через E . Тогда

$$f' = -\frac{i}{\hbar} E f,$$

или

$$f = e^{-iEt/\hbar}$$

с точностью до произвольного постоянного множителя. Таким образом, искомое частное решение имеет вид

$$\psi(x, t) = e^{-(i/\hbar)Et} \varphi(x), \quad (4.41)$$

где функция φ удовлетворяет уравнению

$$H\varphi = E\varphi, \quad (4.42)$$

а это как раз и означает, что соответствующая такому частному решению волновая функция осциллирует с определенной частотой. Мы уже видели, что частота осцилляций волновой функции связана с классической энергией. Поэтому когда волновая функция системы имеет вид (4.41), то говорят, что система обладает определенной энергией E . Каждому значению энергии E соответствует своя особая функция φ — частное решение уравнения (4.42).

Вероятность того, что частица находится в точке x , задается квадратом модуля волновой функции ψ , т. е. $|\psi|^2$. В силу равенства (4.41) эта вероятность равна $|\varphi|^2$ и не зависит от времени. Другими словами, вероятность обнаружить частицу в какой-либо точке пространства не зависит от времени. В таких случаях говорят, что система находится в стационарном состоянии — стационарном в том смысле, что вероятности никак не изменяются со временем.

Подобная стационарность в какой-то степени связана с принципом неопределенности, поскольку, если нам известно, что энергия точно равна E , время должно быть полностью неопределенным. Это согласуется с нашим представлением о том, что свойства атома в точно определенном состоянии совершенно не зависят от времени, и при измерениях мы получали бы тот же самый результат в любой момент.

Пусть E_1 — значение энергии, при котором уравнение (4.42) имеет решение φ_1 , и E_2 — другое значение энергии, соответствующее некоторому другому решению φ_2 . Тогда мы знаем два частных решения уравнения Шредингера, а именно:

$$\varphi_1 = e^{-(i/\hbar)E_1 t} \varphi_1(x) \quad \text{и} \quad \varphi_2 = e^{-(i/\hbar)E_2 t} \varphi_2(x); \quad (4.43)$$

так как уравнение Шредингера линейно, то ясно, что наряду с ψ его решением будет и $c\psi$. Кроме того, если ψ_1 и ψ_2 — два решения уравнения, то и сумма их также является решением. Поэтому ясно, что функция

$$\psi = c_1 e^{-(i/\hbar)E_1 t} \varphi_1(x) + c_2 e^{-(i/\hbar)E_2 t} \varphi_2(x) \quad (4.44)$$

тоже будет решением уравнения Шредингера.

Вообще можно показать, что если известны все возможные значения энергии E и найдены соответствующие им функции φ ,

то любое решение ψ уравнения (4.14) можно представить в виде линейной комбинации всех частных решений типа (4.43), соответствующих определенным значениям энергии.

Полная вероятность найти систему в какой-либо точке пространства, как показано в предыдущем параграфе, является константой. Это должно быть справедливо при любых значениях c_1 и c_2 . Поэтому, используя для функции ψ выражение (4.44) получаем

$$\int \psi^* \psi dx = c_1^* c_1 \int |\varphi_1|^2 dx + c_1^* c_2 \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_1 - E_2) t \right] \int \varphi_1^* \varphi_2 dx + \\ + c_1 c_2^* \exp - \frac{i}{\hbar} (E_1 - E_2) t \int \varphi_1 \varphi_2^* dx + c_2^* c_2 \int \varphi_2^* \varphi_2 dx. \quad (4.45)$$

Так как правая часть должна оставаться постоянной, то зависящие от времени члены (т. е. члены, содержащие экспоненты $\exp [\pm (i/\hbar) (E_1 - E_2) t]$) должны обращаться в нуль независимо от выбора коэффициентов c_1 и c_2 . Это означает, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^* \varphi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1 \varphi_2^* dx = 0. \quad (4.46)$$

Если две функции f и g удовлетворяют соотношению

$$\int f^* g dx = 0,$$

то говорят, что они ортогональны. Таким образом, из равенства (4.46) следует, что два состояния с различной энергией ортогональны.

Ниже будет дана интерпретация выражений типа $\int f^* g dx$, и мы увидим, что равенство (4.46) отражает тот факт, что если частица имеет энергию E [и, следовательно, ее волновая функция $\varphi_1 = \exp (iE_1 t/\hbar) \varphi_1$], то вероятность обнаружить у нее другое значение энергии E_2 [т. е. волновую функцию $\exp (iE_2 t/\hbar) \varphi_2$] должна равняться нулю.

Задача 4.8. Покажите, что когда оператор H эрмитов, то собственное значение E вещественно [для этого следует положить в равенстве (4.30) $f = g = \varphi_1$].

Задача 4.9. Покажите справедливость равенства (4.46) в случае, когда оператор H эрмитов [для этого в равенстве (4.30) положите $f = \varphi_2$, $g = \varphi_1$].

Линейные комбинации функций стационарных состояний. Предположим, что функции, соответствующие набору энерге-

тических уровней E_n , не только ортогональны, но также и нормированы, т. е. интеграл от квадрата их модуля по всем значениям x равен единице:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) dx = \delta_{nm}, \quad (4.47)$$

где δ_{nm} — символ Кронекера, определяемый равенствами $\delta_{nm} = 0$, если $n \neq m$, и $\delta_{nn} = 1$. Большинство известных в физике функций можно представить в виде линейной комбинации ортогональных функций; в частности, в таком виде можно представить любую функцию, являющуюся решением волнового уравнения Шредингера:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x). \quad (4.48)$$

Коэффициенты a_n легко найти; умножая разложение (4.48) на сопряженные функции $\varphi_m^*(x)$ и интегрируя по x , получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^* f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^* \varphi_n dx = a_m \quad (4.49)$$

■, следовательно,

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) f(x) dx. \quad (4.50)$$

Таким образом мы получили тождество

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(y) f(y) dy \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(y) \right] f(y) dy. \quad (4.51)$$

Другой интересный способ получения того же результата исходит из определения δ -функции:

$$\delta(x-y) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(y). \quad (4.52)$$

Ядро K можно выразить через функции φ_n и значения энергии E_n . Мы сделаем это с помощью следующих соображений. Пусть нас интересует, какой вид имеет волновая функция в момент времени t_2 , если она нам известна в момент времени t_1 . Так как она является решением уравнения Шредингера, то при любом t ее,

как и всякое его решение, можно записать в виде

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar) E_n t} \varphi_n(x). \quad (4.53)$$

Но в момент времени t_1

$$f(x) = \psi(x, t_1) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar) E_n t_1} \varphi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x), \quad (4.54)$$

поскольку мы всегда можем представить $f(x)$ в виде ряда (4.48). Отсюда следует, что

$$c_n = a_n e^{+(i/\hbar) E_n t_1}. \quad (4.55)$$

Подставив это в выражение (4.53), будем иметь

$$\psi(x, t_2) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar) E_n t_2} \varphi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \exp \left[+\frac{i}{\hbar} E_n (t_1 - t_2) \right] \varphi_n(x). \quad (4.56)$$

Используя теперь для коэффициентов a_n выражение (4.50), получаем

$$\begin{aligned} \psi(x, t_2) &= \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t_2 - t_1) \right] \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(y) f(y) dy = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(y) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t_2 - t_1) \right] f(y) dy. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Эта формула выражает волновую функцию в момент времени t_2 через волновую функцию $f(x)$, относящуюся к моменту времени t_1 . Ранее мы выражали это соотношением

$$\psi(x, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t_2; y, t_1) f(y) dy. \quad (4.58)$$

Сравнивая его с предыдущим, мы окончательно получаем искомое выражение для ядра $K(2, 1)$:

$$\begin{aligned} &K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \\ &= \begin{cases} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x_2) \varphi_n^*(x_1) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t_2 - t_1) \right], & \text{если } t_2 > t_1, \\ 0, & \text{если } t_2 < t_1. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.59)$$

Задача 4.10. Проверьте, что ядро K , определенное соотношением (4.59), удовлетворяет уравнению Шредингера.

Представление ядра K в виде (4.59) оказывается очень полезным при переходе к более привычным изложениям квантовой механики. Ядро, определенное ранее как интеграл по траекториям, выражено здесь лишь через решения дифференциального уравнения (4.42).

Задача 4.11. Покажите, что в трехмерном случае частные решения уравнения для свободных частиц

$$\varphi_p = e^{(i/\hbar)\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (4.60)$$

соответствуют энергии $E_p = p^2/2m$. Докажите свойство ортогональности, рассматривая в качестве индекса p вектор $\mathbf{p}$, т. е. докажете, что для $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$

$$\int \varphi_p^* \varphi_{p'} d^3\mathbf{r} = 0 \text{ даже если } E_p = E_{p'}. \quad (4.61)$$

В этом случае ядром, описывающим движение свободной частицы, будет выражение

$$K_0(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \sum_{\mathbf{p}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right] \exp \left[-\frac{ip^2(t_2 - t_1)}{2\hbar m} \right]. \quad (4.62)$$

Так как векторы $\mathbf{p}$ составляют континуум, сумма по «индексам» $\mathbf{p}$ фактически эквивалентна интегралу по всем значениям $\mathbf{p}$, т. е.

$$\sum_{\mathbf{p}} () = \int () \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4.63)$$

Ядро для случая свободной частицы запишется как

$$K_0(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \int \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right] \exp \left[-\frac{ip^2(t_2 - t_1)}{2\hbar m} \right] \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4.64)$$

Задача 4.12. Вычислите интеграл (4.64) в квадратурах. Покажите, что результат при этом получается в том виде, какой действительно должен быть у ядра для свободной частицы [т. е. представляет собой трехмерное обобщение выражения (3.3)].

§ 3. Нормировка волновых функций свободной частицы

Вывод формулы для ядра в случае свободной частицы, приведенный в задаче 4.11, неудовлетворителен по двум причинам, которые связаны между собой. Во-первых, понятие суммы по

различным состояниям n , использованной в выражении (4.62), не удовлетворительно, если состояния принадлежат непрерывному спектру, что имеет место в случае свободной частицы. Во-вторых, волновые функции для свободных частиц [плоские волны], хотя и являются ортогональными, однако не могут быть нормированы, так как

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \varphi dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 dx = \infty$$

и не выполнено условие равенства (4.47), которое применялось при выводе выражения (4.62). Оба эти пункта можно одновременно исправить чисто математическим путем. Возвратимся к разложению произвольной функции по собственным функциям φ_n :

$$f(x) = \sum_n a_n \varphi_n(x) \quad (4.65)$$

и учтем, что все или часть состояний могут принадлежать к непрерывному спектру, так что часть суммы по n следует заменить интегралом. Можно математически строго получить корректное выражение для ядра K , аналогичное выражению (4.62), но применимое также и в том случае, когда состояния находятся в непрерывной части спектра.

Нормировка на конечный объем. Многие физики предпочитают другой, менее строгий подход. То, что они делают, заключается в некоторой модификации исходной задачи, причем результаты (в их физическом смысле) изменятся несущественно, однако все состояния оказываются дискретными по энергии и поэтому все разложения принимают вид простых сумм. В нашем примере этого можно достичь следующим образом. Мы рассматриваем амплитуду вероятности перехода из точки (x_1, t_1) в точку (x_2, t_2) за конечное время. Если эти две точки находятся на некотором конечном расстоянии друг от друга и разделяющий их промежуток времени не слишком велик, то в амплитуде заведомо не будет сколько-нибудь заметных различий от того, является ли электрон действительно свободным или предполагается помещенным в какой-то очень большой ящик объемом V со стенками, расположенными очень далеко от точек x_1 и x_2 . Если бы частица могла достичь стенок и вернуться назад за время $t_2 - t_1$, это могло бы сказаться на амплитуде; но если стенки достаточно удалены, то они никак не повлияют на амплитуду.

Конечно, это предположение может стать неверным при некотором специальном выборе стенок; например, если точка x_2 будет находиться в фокусе волн, вышедших из точки x_1 и отраженных

от стенок. Иногда по инерции допускают ошибку, заменяя систему, находящуюся в свободном пространстве, системой, расположенной в центре большой сферы. Тот факт, что система остается точно в центре идеальной сферы, может давать некий эффект (подобно появлению светлого пятна в центре тени от совершенно круглого предмета), который не исчезает, даже если радиус сферы стремится к бесконечности. Влияние поверхности было бы пренебрежимо малым в случае стенок другой формы или для системы, смещенной относительно центра этой сферы.

Рассмотрим сначала одномерный случай. Волновые функции, зависящие от координаты, имеют вид e^{ipx} , где p принимает оба знака. Какой вид будут иметь функции φ , если область изменения x ограничить произвольным интервалом от $-L/2$ до $L/2$? Ответ зависит от граничных условий, определяющих значения φ в точках $x = -L/2$ и $x = L/2$. Простейшими с физической точки зрения являются граничные условия в случае стенок, создающих для частицы сильный отталкивающий потенциал, ограничивая тем самым область ее движения (т. е. при идеальном отражении). В этом случае в точках $x = -L/2$ и $x = L/2$ $\varphi(x) = 0$. Решениями волнового уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = E\varphi, \quad (4.66)$$

соответствующими энергии $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ в области $|x| < L/2$, будут экспоненты e^{ikx} и e^{-ikx} или любая их линейная комбинация. Как e^{ikx} , так и e^{-ikx} не удовлетворяют выбранным граничным условиям, однако при $k = n\pi/L$ (где n — целое число) требуемыми свойствами обладает в случае нечетного n их полусумма (т. е. $\cos kx$), а в случае четного n — деленная на i их полуразность (т. е. $\sin kx$), как это схематически изображено на фиг. 4.1. Таким образом, волновые функции состояний имеют вид синусов и косинусов, а соответствующие им энергетические уровни дискретны и не составляют континуума.

Если решения записать в виде $\sqrt{2/L} \cos kx$ и $\sqrt{2/L} \sin kx$, то они будут нормированы, поскольку

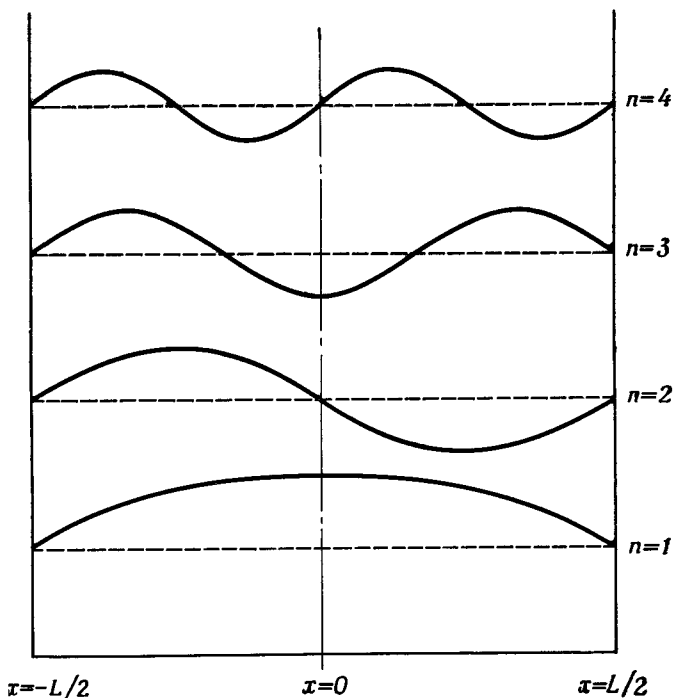
$$\int_{-L/2}^{L/2} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \cos kx \right)^2 dx = 1. \quad (4.67)$$

Сумма по всем состояниям является суммой по n . Если мы рассмотрим, например, синусоидальные волновые функции (т. е. четные значения n), то при небольших значениях x и очень большой величине L (стенки далеки от интересующей нас точки) соседние по номерам n функции различаются весьма незначи-

тельно. Их разность

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{2}{L}} \left[\sin 2\pi (n+1) \frac{x}{L} - \sin 2\pi n \frac{x}{L} \right] &= \\ = 2 \sqrt{\frac{2}{L}} \cos 2\pi \frac{2n+1}{2} \frac{x}{L} \sin 2\pi \frac{x}{2L} &\approx \\ \approx \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{2\pi x}{L} \cos 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{x}{L} &\quad (4.68) \end{aligned}$$

приблизительно пропорциональна малой величине x/L . Поэтому сумму по n можно заменить интегралом по $k = 2\pi n/L$. Так как



Ф и г. 4.1. Вид одномерных волновых функций, нормированных в ящике. Показаны первые четыре из них. Энергии соответствующих уровней равны $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2$, $E_2 = 4E_1$, $E_3 = 9E_1$ и $E_4 = 16E_1$. Абсолютное значение энергии, которое зависит от размеров нашего фиктивного ящика, несущественно для большинства реальных задач. То, что действительно имеет значение, — это соотношение между энергиями различных состояний.

допустимые значения k расположены последовательно с интервалом $2\pi/L$, в промежутке Δk расположено $L/2\pi\Delta k$ состояний. Все это применимо также и к состояниям с косинусоидальной

волновой функцией, поэтому во всех наших формулах мы можем заменить суммы интегралами

$$\sum_{n=0}^{\infty} () \rightarrow \int_0^{\infty} () \frac{dk}{2\pi} L, \quad (4.69)$$

не забывая, что в конце нужно сложить результаты для обоих типов волновых функций, а именно $\sqrt{2/L} \cos kx$ и $\sqrt{2/L} \sin kx$.

Часто бывает неудобным использовать в качестве волновых функций $\sin kx$ и $\cos kx$, и более предпочтительными являются их линейные комбинации

$$e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx \quad \text{и} \quad e^{-ikx} = \cos kx - i \sin kx.$$

Однако, вводя ограниченный объем V , мы вынуждены использовать синусы и косинусы, а не их линейные комбинации, потому что при заданном значении k решением будет лишь одна из этих функций, а не обе сразу. Но если пренебречь малыми погрешностями, являющимися следствием таких небольших различий в значениях k , то мы можем рассчитывать на получение правильных результатов и с этими новыми линейными комбинациями. После нормировки они принимают вид $\sqrt{1/Le^{ikx}}$ и $\sqrt{1/Le^{-ikx}}$. Поскольку волну e^{-ikx} можно рассматривать как волну e^{ikx} , но с отрицательным значением k , наша новая процедура, включая объединение двух типов волновых функций, сводится к следующему практическому правилу: взять волновые функции свободной частицы e^{ikx} , нормировать их на отрезке длины L изменения переменной (т. е. положить $\varphi = \sqrt{1/Le^{ikx}}$) и заменить суммы по состояниям интегралами по переменной k таким образом, чтобы число состояний со значениями k , заключенных в интервале $(k, k + dk)$, было равно $Ldk/2\pi$, а само k изменялось от $-\infty$ до $+\infty$.

Периодические граничные условия. Иногда подобный экскурс к косинусам и синусам, а затем обратно к экспонентам удастся обойти с помощью следующего довода. Так как введение стенки является искусственным приемом, то ее конкретное положение и соответствующее граничное условие не должны иметь какого-нибудь физического значения, если только стенка достаточно удалена. Поэтому вместо физически простых условий $\varphi = 0$ мы можем использовать другие, решениями для которых сразу окажутся экспоненты e^{ikx} . Таковыми условиями являются

$$\varphi\left(\frac{L}{2}\right) = \varphi\left(-\frac{L}{2}\right) \quad (4.70)$$

и

$$\psi' \left(\frac{L}{2} \right) = \psi' \left(-\frac{L}{2} \right). \quad (4.71)$$

Их называют *периодическими граничными условиями*, потому что требование периодичности $\psi(x)$ с периодом L во всем пространстве привело бы к тем же самым условиям. Легко проверить, что функции $\sqrt{1/L} e^{ikx}$ являются нормированными на отрезке L решениями при условии, что $k = 2\pi n/L$, где n — любое целое (положительное или отрицательное) число или нуль. Отсюда непосредственно следует правило, сформулированное выше.

Что происходит в случае трех измерений, мы можем понять, если рассмотрим прямоугольный ящик со сторонами, равными L_x, L_y, L_z . Используем периодические граничные условия, т. е. потребуем, чтобы значения волновой функции и ее первой производной на одной грани ящика были симметрично равны их значениям на противоположной грани. Нормированная волновая функция свободной частицы будет представлять собой произведение

$$\sqrt{\frac{1}{L_x}} e^{ik_x x} \sqrt{\frac{1}{L_y}} e^{ik_y y} \sqrt{\frac{1}{L_z}} e^{ik_z z} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.72)$$

где $V = L_x L_y L_z$ — объем ящика, и допустимыми значениями будут $k_x = 2\pi n_x/L_x$, $k_y = 2\pi n_y/L_y$ и $k_z = 2\pi n_z/L_z$ (n_x, n_y, n_z — целые числа). Кроме того, число решений со значениями k_x, k_y, k_z , лежащими соответственно в интервалах dk_x, dk_y, dk_z , равно произведению

$$\frac{dk_x}{2\pi} L_x \frac{dk_y}{2\pi} L_y \frac{dk_z}{2\pi} L_z = \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} V. \quad (4.73)$$

Другими словами, мы использовали плоские волны, нормированные в объеме V . Число состояний в объеме $d^3\mathbf{k}$ (дифференциальном объеме $\mathbf{k}$ -пространства) равно $V d^3\mathbf{k}/(2\pi)^3$.

Применим это к задаче 4.11 и вспомним установленную в § 1 гл. 3 связь между импульсом и волновым числом $p = \hbar k$. В выражении (4.64) мы должны сделать два изменения. Во-первых, поскольку волновыми функциями у нас были $\exp[(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar]$, в то время как теперь мы должны использовать $\sqrt{1/V} \exp[(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar]$, нужно ввести добавочный множитель $1/V$. [Выражение (4.64) содержит произведение двух волновых функций.] Во-вторых, символ суммы $\sum_p$ надо заменить на интеграл

$V \int () d^3\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$. Все это оправдывает то, что было проделано в § 2 гл. 4, а также результаты вывода в задаче 4.11.

Следует отметить, что множители V сокращаются, как это и должно быть, так как при $V \rightarrow \infty$ ядро K не должно зависеть от размера ящика.

Некоторые замечания о математической строгости. У читателя при виде того, как в конце вычислений объем V сокращается, может возникнуть одна из двух реакций: либо удовлетворение от того, что он сокращается, как это и должно быть, поскольку стенки ни на что не влияют, либо недоумение, почему все делается так нестрого, «грязно» и запутанно, с помощью стенок, которые не имеют никакого реального смысла, и т. д., когда все это можно было бы выполнить намного изящнее и математически строже без всяких стенок и тому подобных вещей. Тип такой реакции зависит от того, мыслите ли вы физически или же математически. По поводу математической строгости в физике между математиками и физиками возникает много недоразумений, поэтому, быть может, уместно дать оценку каждому методу: рассуждениям с ящиком и математически строгому рассмотрению.

Здесь, конечно, содержится более тривиальный вопрос: какой метод для нас более привычен, т. е. требует минимума новых знаний? Прежде чем подсчитывать число различных состояний в ящике, большинство физиков думали прежде всего именно об этом.

Наряду с этим математически строгое решение может быть нестрогим с физической точки зрения; иначе говоря, возможно, что ящик существует на самом деле. Им может быть не обязательно прямоугольный ящик, ведь не часто оказывается, что эксперименты ставят под звездами; чаще их проводят в комнате. Хотя физически представляется вполне разумным, что стенки не должны влиять на опыт, тем не менее такую постановку задачи надо рассматривать как идеализацию. Удаление стенок на бесконечность ничем не лучше, чем замена их достаточно далекими идеальными зеркалами. В первом случае математическая строгость также нарушается, поскольку реальные стенки находятся не на бесконечности.

Подход с привлечением удаленных стенок справедлив и строг настолько же, насколько оправдан. Он обладает несколькими преимуществами. Например, когда объем в заключительных формулах сокращается, мы видим, что несуществен по крайней мере один из аспектов идеализации — насколько стенки удалены. Этот результат интуитивно еще более убеждает нас в том, что истинное расположение реальной окружающей обстановки может быть несущественным. Наконец, полученная формула очень полезна, когда мы действительно имеем случай конечных размеров. Например, в гл. 8 мы воспользуемся ею, чтобы подсчитать число различных звуковых волн в большом блоке вещества прямоугольной формы.

С другой стороны, преимуществом математически строгого подхода является упразднение в сущности ненужной детали,

которая не входит в результат. Хотя введение стенок позволяет кое-что узнать о том, почему же они все-таки ни на что не влияют, тем не менее можно убедиться в справедливости этого, не вникая при этом в детали.

Задача о нормировке волновых функций представляет собой довольно частный пример, но он иллюстрирует главное. Физик не может понять осторожности, проявляемой математиком при решении идеализированной физической задачи. Он знает, что реальная задача намного сложнее. Она уже упрощена с помощью интуиции, которая отбрасывает несущественное и аппроксимирует то, что остается.

ИЗМЕРЕНИЯ И ОПЕРАТОРЫ

До сих пор мы описывали квантовомеханические системы таким образом, как если бы собирались измерять лишь пространственные координаты и время. Все измерения в квантовомеханических системах можно действительно свести в сущности лишь к определению положений и моментов времени (например, к определению положения стрелки измерительного прибора или времени пролета частицы). Поэтому теория, сформулированная на основе понятий, соответствующих пространственно-временным измерениям, будет в принципе достаточно полной для того, чтобы описывать все явления. Тем не менее имеет смысл попытаться непосредственно выяснить вопрос, касающийся, скажем, измерения импульса, не требуя при этом, чтобы окончательное показание прибора сводилось к измерению положений, и не рассматривая в деталях, какие именно части прибора измеряют импульс. Поэтому в данной главе мы не будем концентрировать наше внимание на амплитуде вероятности измерения пространственных координат, а вместо этого рассмотрим амплитуду вероятности найти определенное значение импульса, энергии или какой-либо другой физической величины.

В § 1 этой главы мы покажем, как можно описать квантовомеханическую систему, используя понятия импульса и энергии. Далее, в § 2 мы расширим рассмотрение, что позволит нам в общем случае исследовать квантовомеханическую систему в различных представлениях. Преобразующие функции, которые позволяют переходить от одного представления к другому, имеют много интересных свойств. Среди них понятие оператора, которое было введено в гл. 4 и будет обсуждаться далее в § 3.

§ 1. Импульсное представление

Амплитуда вероятности в импульсном пространстве. Выше мы пользовались понятием вероятности, имея в виду определение положения частицы; теперь допустим, что мы хотим измерить ее импульс. Спрашивается, существует ли такая амплитуда вероятности $\varphi(p)$, квадрат модуля которой дает вероятность $P(p)$ того, что импульс частицы при измерении окажется равным p ?

Такая амплитуда действительно есть, и мы легко можем ее найти. Некоторые способы измерения импульса (или других физических величин) соответствуют измерениям пространственных координат, и, следовательно, они могут быть изучены, если мы знаем, как анализировать измерения координат. Так, например, ограничиваясь одномерным случаем, предположим, что частица при $t = 0$ находится в области $\pm b$ около начала координат оси x . Неопределенность b может быть сколь угодно большой, оставаясь, однако, конечной. Мы можем измерить импульс такой частицы, пользуясь измерением времени ее пролета, т. е. мы можем пронаблюдать, насколько переместилась частица за время $t = T$ (предполагая отсутствие сил). Если новое положение частицы есть x , то ее скорость равна x/T , а импульс $p = mx/T$. Ошибку такого измерения импульса $\pm mb/T$ можно сделать сколь угодно малой, если время T выбрать соответственно достаточно большим.

Предположим, что мы рассматриваем в импульсном пространстве вероятность $P(p)$, определяемую в таком эксперименте. $P(p) dp$ — вероятность того, что значение импульса находится между p и $p + dp$, равна вероятности $P(x) dx$ того, что при внезапном исчезновении всех воздействий на частицу она через промежуток времени T будет находиться между точками x и $x + dx$. Конечно, это обусловлено тем, что импульс p связан с координатой x равенством $p = mx/T$. Допустим, что волновая функция частицы в момент времени $t = 0$ имеет вид $f(y)$, и наша задача заключается в том, чтобы выразить вероятность $P(p)$ непосредственно через волновую функцию $f(y)$.

Амплитуда вероятности того, что частица придет в точку x в момент времени $t = T$, равна

$$\psi(x, T) = \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x, T; y, 0) f(y) dy. \quad (5.1)$$

После подстановки ядра K_0 , описывающего движение свободной частицы, это выражение примет вид

$$\psi(x, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp \frac{imx^2}{2\hbar T} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\exp \frac{-imxy}{\hbar T} \right) \left(\exp \frac{imy^2}{2\hbar T} \right) f(y) dy. \quad (5.2)$$

Квадрат модуля амплитуды $\psi(x, T)$ дает вероятность нахождения частицы между точками x и $x + dx$. В соответствии с нашим определением это совпадает (в пределе $T \rightarrow \infty$) с вероятностью

того, что величина импульса частицы лежит между p и $p + dp$:

$$P(x) dx = \frac{m dx}{2\pi\hbar T} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left[\frac{im}{2\hbar T} (y^2 - 2xy) \right] \right\} f(y) dy \right|^2 = P(p) dp \quad (5.3)$$

при $T \rightarrow \infty$. Подстановка $p = mx/T$ с учетом предельного перехода к большим T приводит к выражению

$$P(p) dp = \frac{dp}{2\pi\hbar} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \left[\exp \left(\frac{imy^2}{2\hbar T} - \frac{ipy}{\hbar} \right) \right] f(y) dy \right|^2. \quad (5.4)$$

Ранее мы предположили, что в начальный момент времени частица должна находиться в некоторой ограниченной области $\pm b$ — около начала координат. Это означает, что начальная волновая функция $f(y)$ спадает до нуля для значений y , больших по абсолютной величине, чем b . Далее, при возрастании T величина $imb^2/2\hbar T$ становится пренебрежимо малой. Так как значения y , большие по абсолютной величине, чем b , не дают вклада в интеграл (5.4), то вероятность $P(p) dp$ будет приближенно равна произведению $dp/2\pi\hbar$ на квадрат модуля амплитуды¹⁾

$$\varphi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\frac{-ipy}{\hbar} \right) f(y) dy. \quad (5.5)$$

Несколько другая интерпретация этого результата дается на фиг. 5.1 и 5.2.

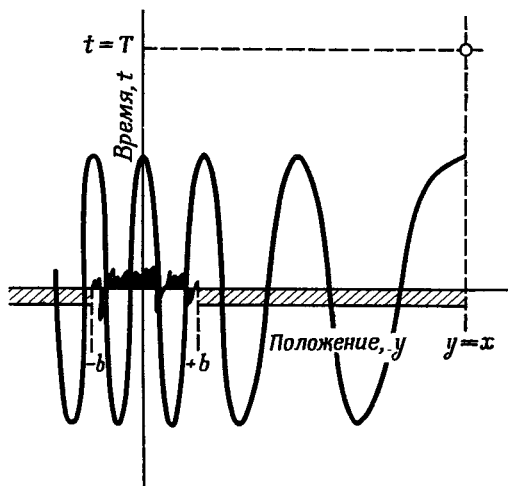
Выражение для амплитуды в импульсном пространстве (5.5) относится к одномерному случаю. Его легко обобщить на трехмерный случай, когда амплитуда вероятности записывается в виде

$$\varphi(p) = \int \left\{ \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p \cdot r) \right] \right\} f(r) d^3r. \quad (5.6)$$

Здесь уже предполагается, что волновая функция $f(r)$ определена во всех точках трехмерного координатного пространства. Амплитуда $\varphi(p)$ представляет собой амплитуду вероятности того, что частица имеет импульс p в момент времени $t = 0$. (Заметим,

¹⁾ Многие авторы предпочитают включать множитель $1/2\pi\hbar$ в определение амплитуды $\varphi(p)$, куда он входит как $1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Однако, следуя изложенному в § 3 гл. 4, мы предпочитаем писать амплитуду в той форме, которую уже применяли, и при этом помнить, что элемент объема в импульсном пространстве у нас всегда включает в себя множитель $1/2\pi\hbar$ для каждой степени свободы. Например, элемент объема в трехмерном импульсном пространстве равен $d^3p/(2\pi\hbar)^3$.

что эта амплитуда не определена для момента времени $t = T$.) Временной интервал T обуславливается самим измерительным прибором, и его можно варьировать, не изменяя при этом величины амплитуды в импульсном пространстве. Квадрат модуля этой амплитуды, умноженный на элемент объема пространства



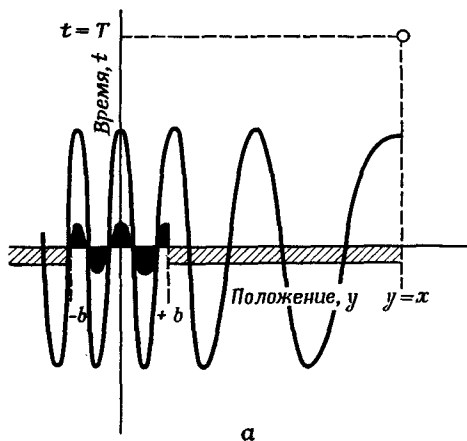
Ф и г. 5.1. Амплитуда вероятности появления частицы, движущейся свободно.

В точке x в интервале времени T она является произведением двух функций. Одна из них $f(y)$ — амплитуда вероятности того, что частица начинает движение из некоторой точки y , как это показано пунктирной линией. Вторая — ядро для свободной частицы $K(x, T; y, 0)$ — является амплитудой перехода из точки y в точку x ; она представлена синусоидой с медленно изменяющейся длиной волны. Конечное положение x мы рассматриваем здесь как начальную точку изменения этой функции, в то время как y у нас — переменная величина. Если расстояние точки x от начала координат значительно больше расстояния между точками $-b$ и $+b$, где функция $f(y)$ не равна нулю, то длина волны остается практически постоянной.

Приближенно ее можно записать в виде $\exp[(i/\hbar)(mx/T)y]$. В окончательном выражении для амплитуды вероятности достижения частицей точки x эти функции перемножаются и произведение их интегрируется по y . Так как все частицы проходят примерно одинаковое расстояние за одно и то же время T (опять-таки в предположении $x \gg b$), это выражение совпадает с амплитудой вероятности того, что импульс частиц равен $p = mx/T$.

импульсов, дает вероятность нахождения импульса в трехмерном интервале импульсного пространства $d^3p/(2\pi\hbar)^3$.

Мы проанализировали возможность измерения импульса на основе измерения времени пролета. Такой же анализ можно было бы провести и для других методов. Рассмотрение любого метода измерения импульса должно привести нас к одному и тому же результату для амплитуды вероятности в пространстве импульсов. Предположим, что у нас есть два прибора, предназначенные для измерения одной и той же величины — импульса. Если они дают разные результаты, то мы должны объяснить это неисправ-

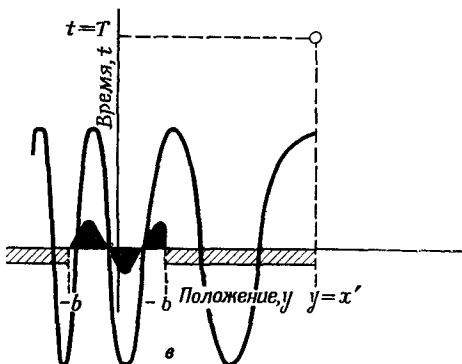
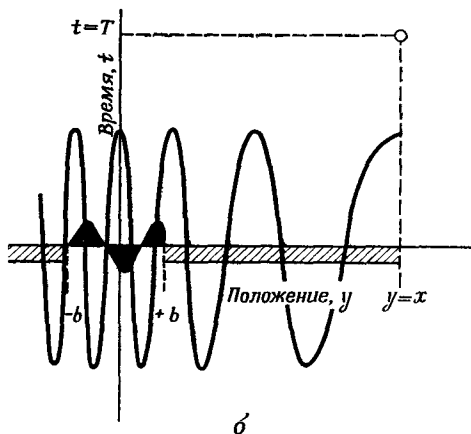


Ф и г. 5.2. Случай периодической амплитуды.

Если приблизительно амплитуду $f(y)$ считать периодической функцией с такой же длиной волны, что и у соответствующего ядра K , как показано на фиг. а, то интеграл от произведения этих двух функций становится очень большим. Это означает, что с большой вероятностью импульс равен mx/T .

Если, с другой стороны, предположить, что длины волн различаются на некоторую новую функцию $f'(y)$, как показано на фиг. б, то после перемножения вклады в интеграл от различных значений y будут взаимно уничтожаться. Вероятность того, что импульс равен mx/T , в этом случае мала.

Если выбрать, как это показано на фиг. в, другое конечное положение x' , то в область $(-b, b)$ попадет совсем другая часть кривой K . При подходящем выборе x' длина волны, соответствующая этой части кривой K , совпадает с длиной волны для функции $f'(y)$ и величина вероятности в этом случае снова возрастает. Другими словами, частицы с большой вероятностью будут иметь новое значение импульса $p = mx'/T$.



ностью одного из приборов. Таким образом, если согласиться, что измерение времени пролета является приемлемым методом определения импульса, то любой прибор, измеряющий импульс, должен давать для распределения импульса $P(p) dp$ тот же самый результат при условии, что система находится в одном и том же состоянии $f(y)$. Анализ любого приспособления, измеряющего импульс, должен давать для амплитуды вероятности, определяющей импульс p , одно и то же выражение $\varphi(p)$ с точностью до несущественной фазовой постоянной (т. е. с точностью до множителя $e^{i\delta}$, где $\delta = \text{const}$). Возьмем, например, следующую задачу.

Задача 5.1. Рассмотрите какой-нибудь прибор, предназначенный для измерения импульса в классическом приближении, такой, например, как масс-спектрограф. Проанализируйте этот прибор, пользуясь методом, которому мы следовали в гл. 4. Покажите, что для амплитуды в пространстве импульсов получается тот же результат.

Переход к импульсному представлению. Мы называли $\varphi(\mathbf{R}, t)$ амплитудой вероятности того, что частица находится в точке $\mathbf{R}$ в момент времени t . Выше показано, что соответствующая амплитуда в пространстве импульсов имеет вид

$$\varphi(\mathbf{p}, t) = \int^{\mathbf{R}} \left\{ \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}) \right] \right\} \psi(\mathbf{R}, t) d^3\mathbf{R}. \quad (5.7)$$

Будем называть ее амплитудой вероятности того, что частица имеет импульс $\mathbf{p}$ в момент времени t .

Часто оказывается более удобным рассматривать задачи не в координатном представлении, а в импульсном, или, как говорят, в пространстве импульсов, а не координат. Фактически переход от одного представления к другому есть не что иное, как преобразование Фурье. Таким образом, если мы имеем импульсное представление и хотим перейти снова к координатному, то воспользуемся обратным преобразованием

$$\psi(\mathbf{R}, t) = \int^{\mathbf{p}} \left[\exp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}) \right] \varphi(\mathbf{p}, t) \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (5.8)$$

Эту формулу можно истолковать на языке тех же физических понятий, которые мы уже использовали для описания структуры других амплитуд. Амплитуда вероятности того, что частица находится в точке $\mathbf{R}$, представляется в виде суммы по всем возможным

альтернативам. В данном случае эти альтернативы соответствуют произведению двух членов. Один из них — амплитуда вероятности того, что импульс частицы равен p , т. е. амплитуда $\psi(p)$. Другой — экспонента $\exp(ip \cdot R/\hbar)$ представляет собой амплитуду вероятности того, что если импульс равен p , то частица находится в точке R . Этот второй множитель не является для нас новым, так как мы уже обсуждали подобное выражение в задаче 4 гл. 3.

Заметим, что в преобразовании (5.7) показатель у экспоненты отрицательный. Это обстоятельство можно истолковать таким же образом, как это делалось в § 3 гл. 4.

Следовательно, $\exp(-ip \cdot R/\hbar)$ представляет собой амплитуду вероятности того, что если частица находится в точке R , то ее импульс равен p .

Ядро в импульсном представлении. Мы показали (см. § 4 гл. 3), как с помощью ядра, которое описывает движение частицы в промежуточные моменты времени, находится волновая функция для некоторого момента времени t_2 , если известна волновая функция для более раннего момента времени t_1 , а именно

$$\psi(R_2, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} \int_{R_1} K(R_2, t_2; R_1, t_1) \psi(R_1, t_1) d^3R_1 dt_1. \quad (5.9)$$

Существует также выражение для ядра в импульсном пространстве, которое можно было бы использовать в аналогичной формуле. Тогда амплитуда в пространстве импульсов для момента времени t_2 окажется выраженной через амплитуду, относящуюся к более раннему моменту времени t_1 :

$$\varphi(p_2, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} \int_{p_1} \mathcal{K}(p_2, t_2; p_1, t_1) \varphi(p_1, t_1) \frac{d^3p_1}{(2\pi\hbar)^3} dt_1. \quad (5.10)$$

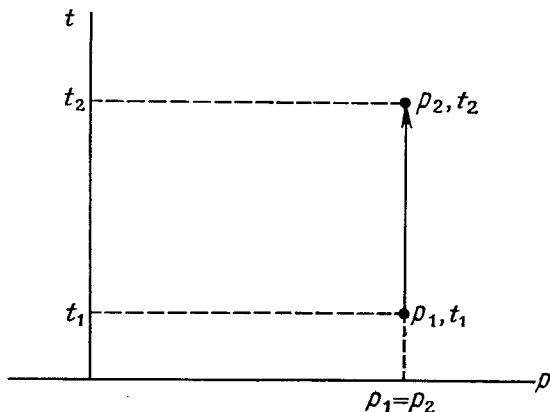
Подставив в соотношение (5.9) значение $\psi(R_1, t_1)$ из формулы (5.8) и выполнив, как это указано в (5.57), преобразование Фурье от функции $\psi(R_2, t_2)$ к $\varphi(p_2, t_2)$, мы выразим ядро в импульсном представлении через его значение в координатном представлении

$$\begin{aligned} & \mathcal{K}(p_2, t_2; p_1, t_1) = \\ & = \int_{R_1} \int_{R_2} e^{-(i/\hbar)p_2 \cdot R_2} K(R_2, t_2; R_1, t_1) e^{+(i/\hbar)p_1 \cdot R_1} d^3R_1 d^3R_2. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Например, ядро, описывающее движение свободной частицы в импульсном пространстве, имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_0(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{p}_1, t_1) &= \\ &= \int_{\mathbf{R}_1} \int_{\mathbf{R}_2} e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{R}_2} K_0(\mathbf{R}_2, t_2; \mathbf{R}_1, t_1) e^{(i\hbar)\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{R}_1} d^3\mathbf{R}_1 d^3\mathbf{R}_2 = \\ &= \begin{cases} (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \exp\left[-\frac{i|\mathbf{p}_1|^2}{2\hbar m}(t_2 - t_1)\right] & \text{при } t_2 > t_1, \\ 0 & \text{при } t_2 < t_1. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Последнее равенство следует из условия (4.28). То, что в это выражение входит дельта-функция, доказывает постоянство импульса свободной частицы, как это видно из фиг. 5.3. Однако



Ф и г. 5.3. Ядро, описывающее движение свободной частицы в импульсном и координатном пространствах.

В импульсном представлении существует единственная траектория, двигаясь по которой частица достигает значения импульса p_2 в момент времени t_2 . Эта траектория должна начинаться со значения импульса $p_1 = p_2$. Все другие траектории не дают вклада в ядро.

фаза волновой функции в импульсном пространстве непрерывно изменяется благодаря множителю $\exp(-iEt/\hbar)$, где $E = p^2/2m$. Этот вывод, следующий из формулы (5.12), можно непосредственно получить также из соотношения (4.64).

Ядро (5.12) открывает возможность для более простого описания свободной частицы, чем ядро в координатном представлении. В общем случае, когда частица не является свободной, а движется под воздействием потенциала, ядро в импульсном представлении не имеет такого простого вида. Однако влияние потенциала можно рассмотреть методами теории возмущений, и выражение в этом случае снова будет достаточно простым.

Преобразование энергия — время. Для многих приложений, в частности в релятивистской квантовой механике, оказывается более удобным рассматривать пространственные и временные координаты симметричным образом. В этом случае к преобразованию перехода от координатного к импульсному представлению присоединяется также преобразование время $\rightarrow$ энергия. Таким образом, полное преобразование ядра будет иметь вид

$$k(p_2, E_2; p_1, E_1) = \int_{-\infty}^{R_1} \int_{-\infty}^{R_2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{t_1}^{\infty} e^{-(i/\hbar)p_2 \cdot R_2} e^{(i/\hbar)E_2 t_2} K(R_2, t_2; R_1, t_1) \times \\ \times e^{(i/\hbar)p_1 \cdot R_1} e^{-(i/\hbar)E_1 t_1} d^3 R_1 d^3 R_2 dt_1 dt_2. \quad (5.13)$$

Заметим, что энергия E здесь не равна $p^2/2m$, а является дополнительным аргументом (коэффициентом, на который умножается время), необходимым для определения ядра. Точное измерение величины E для установления связи между энергией и импульсом можно сделать лишь в том случае, когда система бесконечно долго находится в состоянии с одной и той же энергией.

В качестве примера вычислим ядро для случая свободной частицы. Необходимые интегралы по переменным R_1 и R_2 были уже найдены и определяются формулой (5.12). Нам остается выполнить интегрирование лишь по t_1 и t_2 . Сделаем подстановку $t_2 = t_1 + \tau$. Тогда двойной интеграл можно записать как

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{(i/\hbar)(E_1 - E_2)t_1} dt_1 \int_0^{\infty} e^{(i/\hbar)(E_2 - p^2/2m)\tau} d\tau. \quad (5.14)$$

Первый из этих двух интегралов является интегральным представлением δ -функции Дирака и равен $2\pi\hbar\delta(E_2 - E_1)$. Второй интеграл имеет вид

$$\int_0^{\infty} e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (5.15)$$

Такие интегралы часто встречаются в квантовомеханических задачах; при действительном ω они расходятся. Поэтому для того, чтобы мы могли выполнить наш расчет, заменим ω комплексным числом $\omega + i\varepsilon$. Когда обе величины ω и ε — действительные числа, интеграл равен $i/(\omega + i\varepsilon)$.

Теперь можно было бы просто перейти к пределу этого выражения при ε , стремящемся к нулю, и принять за результат i/ω . Однако такой подход привел бы нас к неправильным (или, точнее, к неполным) результатам в дальнейшем. Функция, которую мы вычисляем, — это ядро, и в дальнейшем ее следует проинтегрировать (после умножения на некоторую другую функцию) по

всем значениям ω или по всем значениям другой некоторой эквивалентной величины. Если в нашем выражении опустить ε , то рассматриваемый интеграл имел бы полюс при значении $\omega = 0$.

Было бы неправильным брать в этом случае просто главную часть интеграла в точке такого полюса. Это дало бы нам неверный результат. В частности, обратное преобразование полученного ядра не привело бы снова к тому первоначальному координатному представлению ядра, из которого мы исходили. Результат преобразования отличался бы от исходного выражения тем, что не обращался бы в нуль при отрицательных значениях времени. Правильный результат для таких интегралов можно получить, если сдвинуть полюс на бесконечно малое расстояние выше действительной оси. Это и достигается введением в наше выражение величины ε .

Преобразовав выражение $i/(\omega + i\varepsilon)$ к виду

$$\frac{i(\omega - i\varepsilon)}{\omega^2 + \varepsilon^2} = \frac{i\omega}{\omega^2 + \varepsilon^2} + \frac{\varepsilon}{\omega^2 + \varepsilon^2}, \quad (5.16)$$

можно первый член в правой части представить как i/ω и в дальнейшем интеграл от него вычислять в смысле главного значения. Второй член при ε , стремящемся к нулю, становится равным $\pi\delta(\omega)$, так что в дальнейшем при интегрировании его следует учитывать именно в таком виде. Это означает, что если мы хотим более точно математически определить значение указанного интеграла, то выражение $i/(\omega + i\varepsilon)$ должно быть заменено на $\text{PP} [(i/\omega) + \pi\delta(\omega)]$. Другими словами,

$$\int_0^\infty e^{i\omega\tau} d\tau = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\omega + i\varepsilon} = \text{PP} \left[\left(\frac{i}{\omega} \right) + \pi\delta(\omega) \right]. \quad (5.17)$$

В последующем во всех выражениях, содержащих ε , будет подразумеваться предельный переход при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Возвращаясь к вычислению ядра, заменим ω на $E_2 - (p^2/2m)$, после чего получим

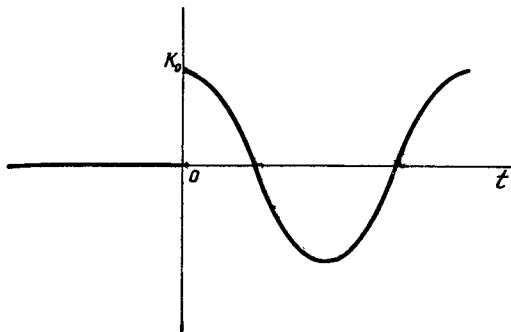
$$K_0(p_2, E_2; p_1, E_1) = (2\pi\hbar)^4 \delta^3(p_2 - p_1) \delta(E_2 - E_1) i \left(E_1 - \frac{p_1^2}{2m} + i\varepsilon \right)^{-1}. \quad (5.18)$$

Наличие δ -функций в этом выражении означает, что ни энергия, ни импульс p не изменяются во время движения свободной частицы. Эти две величины, как это видно из последнего множителя, и определяют движение частицы.

Таким образом, амплитуда движения свободной частицы с энергией E и импульсом p из одной точки в другую пропорциональна $i [E - (p^2/2m) + i\varepsilon]^{-1}$.

В этой главе мы уже отмечали, что энергия E здесь, вообще говоря, не равна $p^2/2m$, а является независимой переменной.

Чтобы понять, чем это обусловлено, рассмотрим ядро для свободной частицы, которое можно представить некоторой осциллирующей функцией в пространстве и времени, где величина E является коэффициентом при переменной времени и, следовательно, обладает свойствами частоты. Ядро, заданное равенством (5.12), представлено на фиг. 5.4 как функция разности времен



Фиг. 5.4. Действительная часть ядра K_0 (описывающего движение свободной частицы) как функция времени.

Для отрицательных моментов времени эта функция обращается в нуль, в точке $t = 0$ она скачкообразно возрастает, а далее имеет вид косинусоидальной волны с постоянной амплитудой и частотой.

$T = t_2 - t_1$. Оно обращается в нуль при отрицательном T и начинает осциллировать при значении $T = 0$. Преобразование от временного к энергетическому представлению эквивалентно преобразованию Фурье. Так как волна образуется сразу при $T = 0$, то фурье-компонента определена при всех значениях частот и, следовательно, для всех энергий. Однако если функция рассматривается на большом временном интервале (много периодов), то в фурье-компоненте начинает преобладать лишь одна из частот. Для свободной частицы такая доминирующая частота соответствует энергии $E_0 = p^2/2m$.

Именно поэтому ядро в случае свободной частицы содержит множитель

$$\frac{i}{E_1 - p_1^2/2m + i\varepsilon} = \text{PP} \left(\frac{i}{E_1^2 - p^2/2m} \right) + \pi \delta \left(E_1^2 - \frac{p^2}{2m} \right). \quad (5.19)$$

Здесь первый член справа учитывает переходные процессы, обусловленные мгновенным возникновением колебаний при $t = 0$. Второй член описывает стационарное поведение и показывает, что по прошествии достаточного времени мы обнаружим, как обычно, значение энергии, равное $p^2/2m$; однако вблизи точки $t = 0$ энергия не определяется этой классической формулой.

Задача 5.2. Пусть мы проделаем преобразование Фурье только для времени и не затронем пространственных переменных. В этом случае

$$k(x_2, E_2; x_1, E_1) = \int \int e^{(i\hbar)E_2 t_2} K(x_2, t_2; x_1, t_1) e^{-(i/\hbar)E_1 t_1} dt_2 dt_1. \quad (5.20)$$

Покажите, что для системы с не зависящим от времени гамильтонианом H

$$k(x_2, E_2; x_1, E_1) = 2\pi\hbar i \delta(E_2 - E_1) \sum_m \frac{\varphi_m(x_2) \varphi_m^*(x_1)}{E_1 - E_m + i\varepsilon}, \quad (5.21)$$

где φ_m — собственные функции, а E_m — собственные значения оператора H .

§ 2. Измерение квантовомеханических величин

Характеристическая функция. В предыдущем параграфе мы показали, каким образом эксперимент, предназначенный для измерения импульса, приводит к определению распределения вероятности импульсов. По результатам правильно поставленного эксперимента можно ответить на вопрос: какова вероятность того, что импульс частицы равен p . Используя тот факт, что существует распределение вероятности различных значений импульса, мы нашли, каким образом волновая функция (или амплитуда вероятности) выражается в зависимости от импульсных переменных. Мы установили, что действительно можем и полностью описать систему и рассматривать задачи в импульсно-энергетическом представлении так же хорошо, как и в пространственно-временном представлении, которым до сих пор пользовались.

Эти результаты относятся не только к импульсным, но и к другим переменным. Если какая-либо физическая величина измерима экспериментально, то ей может быть сопоставлена некоторая функция вероятности. Это означает, что если существует возможность измерять какую-нибудь характеристику нашей системы A (например, x -компоненту импульса), то после многократного повторения эксперимента можно построить распределение вероятности $P(a)$; оно даст нам вероятность того, что в каком-нибудь конкретном эксперименте численное значение A будет найдено равным a .

В общем случае такое распределение можно сопоставить амплитуде вероятности. Эта амплитуда будет выражена через измеряемые переменные, а также будет зависеть от других переменных, необходимых для ее полного определения. Посмотрим, что повлечет за собой обобщение рассмотренного нами примера измерения импульса. Сначала мы рассмотрим лишь одну степень свободы, переход к большему числу измерений не вызовет затруднений. Мы хотим знать, обладает ли наша система свойством G . Например,

G может означать утверждение: значение величины A равно a . У нас должен быть какой-то экспериментальный способ, позволяющий нам ответить на этот вопрос.

Пусть некоторый прибор устроен таким образом, что если частица обладает свойством G , то она пройдет через него и в определенном месте какого-то экрана или какой-то измерительной шкалы появится соответствующая отметка.

Вероятность такого события можно записать как

$$P(G) = \left| \int K_{\text{exp}}(\zeta, x) f(x) dx \right|^2, \quad (5.22)$$

если $f(x)$ — волновая функция измеряемой системы, $K_{\text{exp}}(\zeta, x)$ — ядро, описывающее прохождение частицы через данный экспериментальный прибор, а ζ — точка, в которую попадает частица, обладающая свойством G . Эту вероятность можно представить также и в ином виде:

$$P(G) = \left| \int g^*(x) f(x) dx \right|^2, \quad (5.23)$$

где мы положили

$$g^*(x) = K_{\text{exp}}(\zeta, x). \quad (5.24)$$

(Задание этой функции в комплексно-сопряженном виде принято, как мы увидим далее, только ради удобства.) Таким образом, мы можем сказать, что функция

$$\psi(G) = \int g^*(x) f(x) dx \quad (5.25)$$

представляет собой амплитуду вероятности того, что система обладает свойством G . Это построение иллюстрируется фиг. 5.5.

Само свойство G определяется функцией $g^*(x)$ благодаря следующим обстоятельствам. Предположим, что для измерения данного свойства мы проводим какой-либо другой эксперимент, пользуясь другими приборами, и, следовательно, в этом случае мы должны ввести новое ядро $K_{\text{exp}'}(\eta, x)$. Пусть в этом новом эксперименте частица попадает в точку η . Тогда вероятность обнаружить, что система обладает свойством G , равна

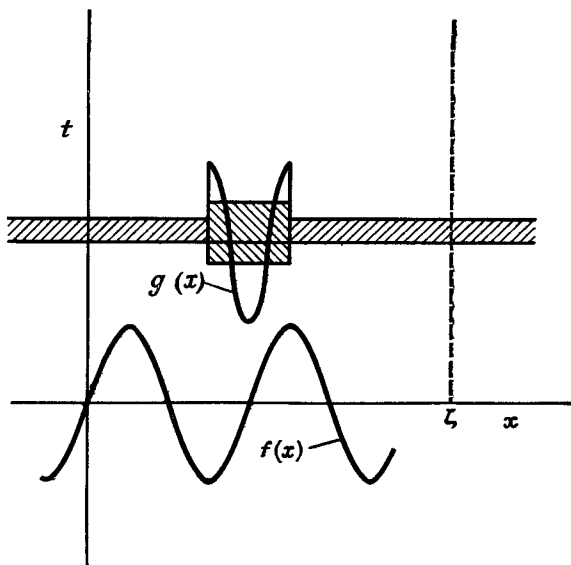
$$\left| \int K_{\text{exp}'}(\eta, x) f(x) dx \right|^2 \quad \text{или} \quad \left| \int g'^*(x) f(x) dx \right|^2. \quad (5.26)$$

Так как мы изучаем одно и то же свойство, то должны получить, во всяком случае для $P(G)$, тот же самый результат, что и в предыдущем эксперименте. Таким образом, для произвольной функции $f(x)$ должно выполняться равенство

$$\left| \int g'^*(x) f(x) dx \right|^2 = \left| \int g^*(x) f(x) dx \right|^2. \quad (5.27)$$

Это означает, что $g^*(x) = g(x)$ с точностью до несущественного фазового множителя $e^{i\phi}$. Следовательно, всем методам, предназначенным для определения одного и того же свойства, соответствует (с точностью до фазы) одна и та же функция $g^*(x)$. Поэтому мы назовем функцию $g^*(x)$ *характеристической функцией* свойства G .

Можно задать другой вопрос: каким должно быть состояние $f(x)$, чтобы быть уверенным, что система определенно обладает свойством G ? (Например, какова волновая функция частицы,



Фиг. 5.5. Устройство, предназначенное для измерения свойства G , помещено между точкой входа налетающей частицы [волновая функция которой $f(x)$] и точкой выхода $x = \zeta$.

Устройство преобразует ядро, описывающее движение (ср. фиг. 5.1 и 5.2) таким образом, что оно становится равным $g(x)$. Произведение $f(x)g(x)$, проинтегрированное по переменной x , представляет собой амплитуду вероятности достичь точки ζ после прохождения через устройство.

имеющей заданный импульс?) Другими словами, мы хотим найти такую функцию $f(x)$, скажем $F(x)$, при которой частица, проходящая через прибор, будет попадать именно в точку ζ , а не в какую-либо другую точку ζ' . Амплитуда вероятности попасть в точку ζ' должна быть пропорциональна $\delta(\zeta - \zeta')$ (т. е. равна нулю во всех точках, за исключением $\zeta = \zeta'$). Следовательно,

$$\int K_{\text{exp}}(\zeta, x) F(x) dx = \delta(\zeta - \zeta'). \quad (5.28)$$

Это уравнение можно решить, используя соотношение между комплексно-сопряженным и обратным ядром, полученное в § 1

гл. 4. Из формулы (4.37) мы имеем

$$\int K_{\text{exp}}(\zeta', x) K_{\text{exp}}^*(\zeta, x) dx = \delta(\zeta - \zeta'), \quad (5.29)$$

так что

$$F(x) = K_{\text{exp}}^*(\zeta, x) = g(x). \quad (5.30)$$

Это означает, что функция $g(x)$ — волновая функция частицы, которая заведомо обладает свойством G . Итак, мы можем сказать, что частица обладает свойством G , т. е. находится в состоянии $g(x)$. Таким образом мы установили: если частица находится в состоянии $f(x)$, то амплитуда вероятности найти ее в состоянии $g(x)$ есть

$$\psi(G) = \int g^*(x) f(x) dx = \Phi[g(x)]. \quad (5.31)$$

Для большего числа степеней свободы x берется в пространстве нескольких измерений.

Можно дать и не столь строгую формулировку вышесказанного: вероятность того, что частица находится в состоянии $g(x)$, равна $|\int g^*(x) f(x) dx|^2$. Эта формулировка хороша, когда мы знаем, что имеем при этом в виду. На самом деле система находится в состоянии $f(x)$, а не в состоянии $g(x)$, но если при измерении мы хотим узнать, будет ли она *также* находиться в состоянии $g(x)$, то вероятность получить утвердительный ответ равна:

$$P(G) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} g^*(x) f(x) dx \right|^2 = \mathcal{P}[g(x)]. \quad (5.32)$$

Измерение, с помощью которого выясняется, находится ли система в состоянии $g(x)$ или нет, покажет, что система действительно находится в этом состоянии, если волновая функция системы равна $g(x)$. Для других волновых функций повторение эксперимента даст утвердительный ответ лишь в некоторой части случаев, составляющей от всех испытаний долю P . Это является центральным пунктом вероятностной интерпретации квантовой механики.

Из всего этого следует одно интересное соотношение между самой волновой функцией и функцией, комплексно ей сопряженной. В соответствии с нашим пониманием соотношения (5.25) функция $g^*(x)$ представляет собой амплитуду вероятности того, что если система анимает положение x , то она обладает свойством G (это утверждение можно записать математически, если вместо функции $f(x)$ в формулу (5.31) подставить δ -функцию); с другой стороны, $g(x)$ — амплитуда вероятности того, что система, обладающая свойством G , находится в точке x . (Это как раз и является способом определения волновой функции.) Одна из этих функций дает амплитуду вероятности в таком случае: если имеется A ,

то имеется и B ; другая определяет ее для обратного случая: если имеется B , то имеется A . Переход осуществляется здесь простым комплексным сопряжением.

Соотношение (5.31) может быть интерпретировано следующим образом: амплитуда вероятности того, что система обладает свойством G , представляет собой сумму по всем значениям x произведений амплитуды $f(x)$, описывающей вероятность того, что система находится в положении x , и амплитуды $g^*(x)$, определяющей вероятность того, что если система занимает положение x , то она обладает свойством G .

Задача 5.3. Пусть интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) f(x) dx$, который дает полную вероятность найти в каком-либо месте частицу с волновой функцией $f(x)$, нормирован так, что его значение равно единице. Покажите, что при этом условии состояние $f(x)$, в котором частица с наибольшей вероятностью будет обладать свойством G , совпадает с $g(x)$.

Задача 5.4. Допустим, что $\psi(x_1)$ — волновая функция системы в момент времени t_1 . Пусть при движении в интервале времени $t_2 \geq t \geq t_1$ поведение системы описывается ядром $K(x_2, t_2; x_1, t_1)$.

Покажите, что вероятность найти систему в состоянии $\chi(x)$ в момент времени t_2 дается квадратом интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x_2) K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1) dx_1 dx_2.$$

Мы будем называть этот интеграл *амплитудой* перехода из состояния $\psi(x)$ в состояние $\chi(x)$.

Измерение нескольких величин. В наших рассуждениях в гл. 4 мы предполагали идеальный эксперимент, когда одновременно с величиной A нельзя измерить никакую другую величину. Иначе говоря, мы допускали, что существует не более одной функции $g(x)$, приводящей к данному результату, и утверждали тем самым, что при измерении величины A мы получаем максимум информации о нашей системе.

Однако в действительности состояние системы в общем случае определяется несколькими переменными. Так, например, если в трехмерном пространстве измеряется только x -компонента импульса, то мы не сможем однозначно определить функцию $g(x)$: волновые функции $\exp(ip_x x/\hbar)$ и $\exp[(ip_x x/\hbar) - (ip_y y/\hbar)]$ дадут одинаковое значение x -компоненты импульса p_x . Таким образом, если в трехмерной системе координат измерять лишь значение

компоненты p_x , то частицы в направлении оси y могут двигаться с любым импульсом и это не скажется на результатах измерений. Не требуется даже, чтобы частица попадала в одну и ту же точку измерительного устройства. Все частицы, которые попадают на некоторую линию или совокупность точек, могут иметь одно и то же значение p_x .

Так что в общем случае волновая функция $g(x)$ определит свойство G следующим образом: состояние, которое описывается волновой функцией $g(x)$, безусловно, обладает свойством G . Однако обратное утверждение не всегда верно. Поэтому совсем не обязательно, чтобы все состояния, обладающие свойством G , описывались одной и той же волновой функцией $g(x)$. Лишь в том случае, когда G включает перечень всех величин, которые могут быть одновременно измерены, волновая функция полностью определяется самим свойством G . Но даже и тогда остается неопределенным постоянный фазовый множитель $e^{i\delta}$ (который не имеет, однако, существенного значения).

Легко получить необходимое обобщение характеристической функции $g^*(x)$ для случая, когда наш мысленный эксперимент предполагает измерение более чем одной переменной. Пусть мы имеем некий набор величин (назовем их $A, B, C, \dots$), которые могут быть одновременно измерены в предполагаемом эксперименте; например, это будут x -компонента импульса, y -компонента и т. д. Предположим, что мы можем полностью описать состояние системы, определяя некоторые числа $a, b, c, \dots$, соответствующие этим величинам. Таким образом, мы полностью описываем систему, утверждая, что она обладает или не обладает определенным свойством. В данном случае утверждение, что система имеет определенное свойство, означает, что величина A равна a , величина B равна b и т. д. Кроме того, предположим, что одновременно с этим мы не можем получить никакой другой информации, которую нельзя было бы вывести, зная численные значения величин $A, B, C, \dots$.

Пусть наша экспериментальная установка способна измерять все эти величины, т. е. позволяет нам выяснить, обладает ли данное состояние таким свойством, при котором значение величины A равно a , и т. д. Мы назовем характеристической функцией такого свойства функцию

$$g^*(x) = \chi_{a, b, c, \dots}^*(x). \quad (5.33)$$

Эта функция зависит, конечно, от чисел $a, b, c, \dots$, для измерения которых ставится эксперимент, а также от координаты x .

Предположим, что система находится в состоянии $f(x)$. Тогда вероятность того, что эксперимент дает для A значение, равное a , для B — значение, равное b , и т. д. (другими словами, вероятность

того, что состояние обладает интересующим нас свойством), есть

$$P(a, b, c, \dots) = \left| \int \chi_{a, b, c, \dots}^*(x) f(x) dx \right|^2. \quad (5.34)$$

Преобразующие функции. Пусть система заведомо находится в состоянии $\chi_{a', b', c', \dots}$, т. е. значение переменной A равно a' и т. д. Тогда вероятность того, что в нашем эксперименте система будет обнаружена в состоянии, описываемом величинами $a, b, c, \dots$, равна нулю, если не выполнены равенства $a' = a$, $b' = b$, $c' = c, \dots$. Это значит, что с учетом соответствующих нормирующих множителей

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{a, b, c, \dots}^*(x) \chi_{a', b', c', \dots}(x) dx = \delta(a - a') \delta(b - b') \delta(c - c'). \quad (5.35)$$

Функция $\chi_{a, b, c, \dots}(x)$ представляет собой амплитуду вероятности обнаружения системы в положении x , если она находится в состоянии, описываемом величинами $a, b, c, \dots$. Функция $\chi_{a, b, c, \dots}^*(x)$, которую мы называли характеристической функцией, является амплитудой вероятности обнаружить систему в состоянии, определяемом величинами $a, b, c, \dots$, если известно, что она находится в положении x .

Пусть мы знаем, что состояние системы описывается функцией $f(x)$; тогда выражение

$$F_{a, b, c, \dots} = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{a, b, c, \dots}^*(x) f(x) dx \quad (5.36)$$

есть не что иное, как амплитуда вероятности найти систему в состоянии, при котором величина A имеет значение a , величина B — значение b и т. д.

Величины $F_{a, b, c, \dots}$ могут применяться для описания состояний системы с тем же успехом, что и функция $f(x, y, z, \dots)$. Действительно, если мы знаем $F_{a, b, c, \dots}$, то с помощью обратного преобразования можем восстановить и функцию $f(x, y, z, \dots)$.

Функция $F_{a, b, c, \dots}$ называется ABC -представлением данного состояния. Примером такого рода может служить импульсное представление, которое мы рассматривали в предыдущем параграфе. Функция $f(x, y, z, \dots)$ является обычным координатным или xuz -представлением состояния. Переход от одного представления к другому осуществляется с помощью функций χ и χ^* . В частности, $\chi_{a, b, c, \dots}^*(x, y, z, \dots)$ — преобразующая функция перехода от координатного представления к ABC -представлению, тогда как $\chi_{a, b, c, \dots}(x, y, z, \dots)$ — преобразующая функ-

ция обратного перехода. Таким образом, преобразование, обратное преобразованию (5.36), имеет вид

$$f(x, y, z, \dots) = \sum_a \sum_b \sum_c \dots F_{a,b,c,\dots} \chi_{a,b,c,\dots}(x, y, z, \dots). \quad (5.37)$$

Это говорит о том, что амплитуда вероятности обнаружить систему в положении x равна сумме по всем возможным значениям величин $a, b, c, \dots$ произведений двух функций: $F_{a,b,c,\dots}$ — амплитуды вероятности обнаружить систему с $A = a, B = b, \dots$ и $\chi_{a,b,c,\dots}(x)$ — амплитуды вероятности обнаружения системы в положении x при условии, что $A = a, B = b, \dots$.

Задача 5.5. Предположим, что функцию $f(x, y, z, \dots)$ можно записать в виде

$$f(x, y, z, \dots) = \sum_a \sum_b \sum_c \dots F'_{a,b,c,\dots} \chi_{a,b,c,\dots}(x, y, z, \dots). \quad (5.38)$$

Подставляя это соотношение в формулу (5.36) и используя свойство ортогональности функций χ (5.35), покажите, что

$$F'_{a,b,c,\dots} = F_{a,b,c,\dots}$$

Задача 5.6. Пусть A, B, C — три декартовы компоненты импульса p_x, p_y, p_z . Каков вид функции $\chi_{a,b,c}(x, y, z)$? Используя результаты § 2 гл. 5, проверьте соотношения, полученные в § 1 гл. 5.

Задача 5.7. Предположим, что $ABC\dots$ -представление не является ни координатным, ни импульсным, а есть некое третье представление состояния системы. Допустим, что нам известна функция $\chi_{a,b,c,\dots}(x, y, z, \dots)$, которая позволяет выполнить прямой и обратный переходы от координатного представления к $ABC\dots$ -представлению. Пусть нам известна также преобразующая функция, необходимая для перехода от координатного представления к импульсному. Какой вид имеет тогда функция, позволяющая определить переходы между импульсным представлением и $ABC\dots$ -представлением?

§ 3. Операторы

Ожидаемые значения. Мы можем рассмотреть теперь некоторые другие свойства преобразующих функций. Попытаемся ответить на такой вопрос: система находится в состоянии, которое определяется волновой функцией $f(x)$, и мы измеряем величину A ; какое среднее значение получится для величины A при многократном повторении эксперимента? Мы будем обозначать это

среднее значение, называемое иногда *ожидаемым значением*, символом $\langle A \rangle$.

Предположим, что в принципе возможно одновременное измерение нескольких физических величин $A, B, C, \dots$, причем измерение величины A дает какое-то одно значение из непрерывного или дискретного ряда чисел a , измерение величины B — некоторое значение $b, \dots$. Вероятность получить определенный набор $a, b, c, \dots$ равна $|F_{a, b, c, \dots}|^2$, а вероятность получить для величины A некоторое значение a при любых $B, C, \dots$ (например, вообще не измеряя последние) равна

$$P(a) = \sum_b \sum_c \dots |F_{a, b, c, \dots}|^2. \quad (5.39)$$

Суммирование в этом равенстве производится по всем возможным значениям непрерывного или дискретного ряда величин $b, c, \dots$.

Среднее, или ожидаемое, значение результата измерения величины A получается умножением вероятности (5.39) на величину a и последующим суммированием произведений по всем возможным значениям этого a . Таким образом,

$$\langle A \rangle = \sum_a \sum_b \sum_c \dots a |F_{a, b, c, \dots}|^2. \quad (5.40)$$

Необходимость вычисления подобных средних значений часто возникает при решении квантовомеханических задач. Поэтому полезно иметь формулы, упрощающие такие вычисления. Этот вопрос, связанный с операторами, уже обсуждался вкратце в § 1 гл. 4. Здесь мы получим несколько дополнительных результатов. Однако нигде в данной книге мы не будем обстоятельно излагать операторное исчисление, поскольку имеется целый ряд блестящих работ, посвященных этому вопросу (см., например, [24]).

Операторы. Понытаемся выразить ожидаемое значение величины A непосредственно с помощью исходной волновой функции $f(x)$. Для этого прежде всего заметим, что квадрат абсолютного значения функции $F_{a, b, c, \dots}$ можно записать как

$$|F_{a, b, c, \dots}|^2 = F_{a, b, c, \dots}^* F_{a, b, c, \dots}. \quad (5.41)$$

Используя формулу (5.36), получаем

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_a \sum_b \sum_c \dots a \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{a, b, c, \dots}(x) f^*(x) dx \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{a, b, c, \dots}^*(x') f(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) R(x) dx. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Во второй строке этого равенства мы обозначили

$$R(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G_A(x, x') f(x') dx', \quad (5.43)$$

где

$$G_A(x, x') = \sum_a \sum_b \sum_c \dots a \chi_{a, b, c, \dots}(x) \chi_{a^*, b, c, \dots}^*(x'). \quad (5.44)$$

Соотношение (5.43) говорит о том, что функция $R(x)$ получается из функции $f(x)$ в результате интегрирования, выполненного с помощью соответствующего величине A линейного интегрального оператора $G_A(x, x')$. Соотношения, подобные (5.43), часто символически записываются в виде

$$R = \mathcal{A}f, \quad (5.45)$$

где символом $\mathcal{A}$ обозначен линейный оператор, действующий на функцию f . В данном случае $\mathcal{A}$ означает операцию, которую следует выполнить в правой части соотношения (5.43), т. е. умножение на функцию G_A и интегрирование. Оператор $\mathcal{A}$ сопоставлен физической величине A . Используя эти обозначения, можно написать

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \mathcal{A}f(x) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) G_A(x, x') f(x') dx dx'. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Задача 5.8. Отметим, что из формулы (5.44) следует равенство $G_A^*(x, x') = G_A(x', x)$. Принимая во внимание этот факт, покажите, что для любых двух волновых функций $g(x)$ и $f(x)$, каждая из которых стремится к нулю, когда $x \rightarrow \pm \infty$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^*(x) \mathcal{A}f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} [\mathcal{A}f(x)]^* f(x) dx. \quad (5.47)$$

Всякий оператор, подобный $\mathcal{A}$, для которого имеет место равенство (5.47), называется эрмитовым [ср. равенство (4.30)].

Задача 5.9. Преобразующая функция перехода от пространственного к импульсному представлению имеет вид

$$\chi_{a, b, c}(\mathbf{r}) = e^{(i/\hbar)\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (5.48)$$

(см. задачу 5.6). В качестве физической величины A выберем x -компоненту импульса p_x . Покажите, что функция G_A имеет вид

$$G_{p_x}(x, x') = \frac{\hbar}{i} \delta'(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z'), \quad (5.49)$$

где $\delta'(x) = (d/dx) \delta(x)$. Используя этот результат, определите оператор, соответствующий x -компоненте импульса, и покажите, что ожидаемое значение этой компоненты можно записать как

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} dx. \quad (5.50)$$

Задача 5.10. Предположим, что величина A является пространственной координатой x . Покажите, что правильная формула для среднего значения x получается в том случае, если функция $G_A(x, x')$ выбрана в виде

$$G_x(x, x') = x \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z'), \quad (5.51)$$

а оператор, соответствующий координате x , представляет собой просто умножение на x , т. е.

$$\mathcal{X}f(x) = xf(x). \quad (5.52)$$

Собственные функции и собственные значения. Действие оператора $\mathcal{A}$ на волновые функции $\chi_{a, b, c, \dots}$, определенные в § 2 гл. 5, имеет очень простой вид:

$$\mathcal{A}\chi_{a, b, c, \dots}(x) = a\chi_{a, b, c, \dots}(x). \quad (5.53)$$

Задача 5.11. Докажите справедливость этого соотношения. В том случае, когда функция χ удовлетворяет уравнению, подобному (5.53), мы будем говорить, что χ является собственной функцией оператора $\mathcal{A}$, соответствующей его собственному значению a .

Если две физические величины измеримы одновременно, то операторы, соответствующие этим величинам, например $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$, будут удовлетворять некоторому интересному соотношению, а именно $\mathcal{A}(\mathcal{B}f) = \mathcal{B}(\mathcal{A}f)$. Это значит, что результат последовательного действия двух операторов не зависит от того, в каком порядке они расположены. Тогда говорят, что операторы коммутируют друг с другом:

$$\mathcal{A}\mathcal{B} = \mathcal{B}\mathcal{A}.$$

Вообще говоря, мы не можем ожидать, что два любых оператора коммутируют, однако в данном частном случае это имеет место. Причина заключается в том, что физические величины A и B являются измеримыми одновременно; они могут составлять

часть набора измеримых величин $A, B, C, \dots$, соответствующих одной и той же характеристической функции $a, b, c, \dots$. Если в уравнении (5.53) оператор $\mathcal{B}$ поместить перед оператором $\mathcal{A}$, а величину b поставить перед a , то равенство не нарушится, так что

$$\mathcal{A}(\mathcal{B}\chi) = \mathcal{A}(b\chi) = b(\mathcal{A}\chi) = ba\chi = ab\chi. \quad (5.54)$$

Это справедливо, поскольку a и b — обычные числа, а не операторы. Точно так же

$$\mathcal{B}(\mathcal{A}\chi) = \mathcal{B}(a\chi) = a(\mathcal{B}\chi) = ab\chi. \quad (5.55)$$

Сравнение этих двух равенств доказывает коммутативность операторов $\mathcal{B}$ и $\mathcal{A}$, когда они действуют на какую-либо из функций $\chi_{a, b, c, \dots}$. Так как оба эти оператора линейны (т. е. не содержат операций, требующих учета высших степеней функции χ), то соотношение коммутации должно выполняться для любой линейной комбинации функций χ .

Если χ -функции образуют «полный набор» (что является для них типичным), то в общем случае любую функцию мы можем представить в виде суммы таких линейных комбинаций. Следовательно, если операторы AB и BA дают один и тот же результат при действии на произвольную функцию, это означает, что операторы A и B коммутируют.

Задача 5.12. Покажите, что пространственную координату x и x -компоненту импульса p_x нельзя измерить одновременно.

Возможны ситуации, когда набор коммутирующих операторов $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots$ уже известен и требуется найти функции, которые им соответствуют (т. е. их собственные функции). Для этого нужно найти решения уравнений

$$\mathcal{A}\chi = a\chi, \quad \mathcal{B}\chi = b\chi, \quad \mathcal{C}\chi = c\chi, \dots \quad (5.56)$$

Предположим, например, что операторы x -й, y -й и z -й компонент импульса p_x, p_y и p_z определены соответственно как $[(\hbar/i) (\partial/\partial x)]$, $[(\hbar/i) (\partial/\partial y)]$, $[(\hbar/i) (\partial/\partial z)]$. Спрашивается, каковы собственные функции этого набора операторов, соответствующие состоянию, в котором p_x имеет значение a , p_y — значение b , а p_z — значение c ?

(Числа $a, b, c, \dots$ являются здесь, конечно, собственными значениями.) Для этого мы должны решить уравнения

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi}{\partial x} = a\chi, \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi}{\partial y} = b\chi, \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi}{\partial z} = c\chi. \quad (5.57)$$

С точностью до произвольного постоянного множителя решение этих уравнений имеет вид $\exp[(i/\hbar)(ax + by + cz)]$. Это согласуется с полученными выше выводами о том, что частица, имеющая данный импульс $\mathbf{p}$, описывается волновой функцией $\exp(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})$.

Разложение по собственным функциям оператора энергии. Различные выражения, содержащие собственные функции $\varphi_n(x)$, могут быть теперь истолкованы гораздо полнее. Рассмотрим, например, разложение (4.59) ядра K в ряд по функциям φ_n , являющимися решениями уравнения Шредингера с постоянным гамильтонианом:

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sum_n \varphi_n(x_2) \varphi_n^*(x_1) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t_2 - t_1) \right]. \quad (5.58)$$

Прежде всего заметим, что функция $\varphi_n(x)$ является амплитудой вероятности обнаружения системы в положении x , если известно, что она находится в состоянии n . Поэтому в соответствии с нашими рассуждениями в § 2 гл. 5 сопряженная ей функция $\varphi_n^*(x)$ является амплитудой вероятности найти систему в состоянии n , если она занимает положение x . На основе этого попробуем интерпретировать выражение (5.58) следующим образом. Амплитуда вероятности перехода из положения 1, соответствующего моменту времени t_1 , в положение 2 в момент времени t_2 выражается в виде суммы по всем возможным состояниям. В данном случае эти возможные состояния будут различными энергетическими состояниями, в которых может происходить переход. Следовательно, мы должны просуммировать по всем этим состояниям произведение следующих членов: 1) $\varphi_n^*(x_1)$ — амплитуды вероятности найти систему в точке x_1 , если известно, что она находится в состоянии n ; 2) $\exp \left[- (i/\hbar) E_n (t_2 - t_1) \right]$ — амплитуды вероятности найти систему в состоянии n в момент времени t_2 , если в момент времени t_1 , она была в состоянии n^1 ; 3) $\varphi_n(x_2)$ — амплитуды вероятности найти систему в точке x_2 , если мы знаем, что она находится в состоянии n .

Задача 5.13. Обсудите возможность интерпретации функции $\varphi_n(x)$ как функции $\chi_{a,b,c,\dots}(x)$, рассмотренной в § 2, т. е. покажите, что функция $\varphi_n(x)$ является преобразующей функцией для перехода от x -представления к представлению, определяемому числом n (так называемому энергетическому представлению).

¹) Эта амплитуда не связана с изменением состояния. В этом и заключено важное значение рассматриваемых нами функций φ_n .

МЕТОД ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В гл. 3 мы видели, как можно описать поведение квантово-механической системы с помощью метода интегралов по траекториям, если в выражение функции действия S входит потенциал, имеющий только квадратичные члены. Однако потенциалы, с которыми мы встречаемся при решении ряда важных задач квантовой механики, не имеют такого частного вида и не могут быть рассмотрены столь просто. В данной главе развивается приближенный метод, который позволит рассматривать такие более сложные потенциалы. Этот метод называется теорией возмущений и оказывается особенно полезным, когда потенциал относительно невелик (по сравнению, например, с кинетической энергией системы).

Хотя разложение в ряд теории возмущений может быть получено и строго математически, ему тем не менее интересно дать физическое истолкование, которое позволяет глубже понять поведение квантовомеханических систем.

В § 4 мы займемся некоторыми приложениями теории возмущений. Например, рассмотрим движение электрона, рассеивающегося на атоме. Оказывается, что для описания взаимодействия, сопровождающего рассеяние, полезно использовать классическое понятие поперечного сечения рассеяния, т. е. понятие эффективной площади атома-мишени по отношению к рассеиваемому электрону. Хотя это сечение связано с реальными размерами атома, мы покажем, что оно определяется также и квантовомеханическими свойствами взаимодействующих систем.

§ 1. Ряд теории возмущений

Члены ряда. Предположим, что частица движется под действием потенциала $V(x, t)$. Ограничимся пока одномерным движением. Тогда ядро, соответствующее переходу между точками a и b , будет иметь вид

$$K_V(b, a) = \int_a^b \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(xt) \right] dt \right\} \right) \mathcal{D}x(t). \quad (6.1)$$

Индекс V в обозначении K_V отражает тот факт, что на частицу действует потенциал V . Отсюда обозначение K_0 будет относиться к ядру, описывающему движение свободной частицы.

В некоторых случаях ядро K_V может быть определено с помощью уже изученных методов. Например, в гл. 3 мы вычислили ядро для гармонического осциллятора, на который действует внешняя сила $f(t)$. Потенциал в этом случае имеет вид

$$V(x, t) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2 - x f(t) \quad (6.2)$$

[см. лагранжиан (3.65)]. В общем случае, когда потенциал квадратичен по переменной x , ядро может быть вычислено точно; наряду с этим при достаточно медленном изменении потенциала оказывается хорошо применимым квазиклассическое приближение. Известны также некоторые другие типы потенциалов, которые удобно рассматривать с помощью уравнения Шредингера. Теперь обратимся к изучению самих разложений, которые часто оказываются полезными при малых возмущающих потенциалах.

Пусть потенциал действительно мал; более точно предположим, что мал по сравнению с величиной $\hbar$ интеграл по времени от потенциала вдоль траектории. Тогда та часть экспоненциального члена в подынтегральном выражении (6.1), которая зависит от $V(x, t)$, может быть разложена в ряд

$$\begin{aligned} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt \right] = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt + \\ + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left[\int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt \right]^2 + \dots, \end{aligned} \quad (6.3)$$

который определен для некоторой частной траектории $x(t)$. Подставляя это разложение в (6.1), получаем

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) + K^{(1)}(b, a) + K^{(2)}(b, a) + \dots, \quad (6.4)$$

где

$$K_0(b, a) = \int_a^b \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m \dot{x}^2}{2} dt \right) \right] \mathcal{D}x(t), \quad (6.5)$$

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m \dot{x}^2}{2} dt \right) \right] \int_{t_a}^{t_b} V[x(s), s] dS \mathcal{D}x(t), \quad (6.6)$$

$$\begin{aligned} K^{(2)}(b, a) = -\frac{1}{2\hbar^2} \int_a^b \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m \dot{x}^2}{2} dt \right) \right] \int_{t_a}^{t_b} V[x(s)] ds \times \\ \times \int_{t_a}^{t_b} V[x(s'), s'] ds' \mathcal{D}x(t) \end{aligned} \quad (6.7)$$

и т. д.

Чтобы не перепутать временные переменные, по которым проводится интегрирование, мы обозначили их здесь через s , s' и т. п.

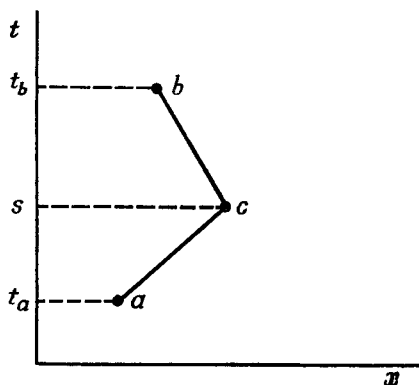
Вычисление членов ряда. Рассмотрим сначала ядро $K^{(1)}$. Для нас удобнее изменить порядок интегрирования по переменной x и по траектории $x(t)$. Запишем

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} F(s) ds, \quad (6.8)$$

где

$$F(s) = \int_a^b \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m\dot{x}^2}{2} dt \right) \right] V[x(s), s] \mathcal{D}x(t). \quad (6.9)$$

Интеграл по траектории $F(s)$ имеет следующий смысл: это амплитуда вероятности свободной частицы, просуммированная по всем траекториям. При этом каждая траектория входит сюда



Ф и г. 6.1. Движение с одним рассеянием.

Частица выходит из точки a и движется как свободная до точки c . Здесь на нее действует потенциал $V_c = V[x(s), s]$, происходит рассеяние. После этого частица движется как свободная до точки b . Амплитуда, описывающая такое движение, дается выражением (6.10). Если эту амплитуду проинтегрировать по всем возможным положениям точки c , то получим член первого порядка теории возмущений.

с весом, равным значению потенциала $V[x(s), s]$, вычисленного в момент времени s . Единственная характеристика траектории $x(t)$, от которой зависит потенциал V , — это положение траектории в некоторый момент времени $t = s$. Другими словами, до и после этого момента s содержащаяся в функционале $F(s)$ траектория совпадает с траекторией обычной свободной частицы. Все вышесказанное поясняет фиг. 6.1.

Основываясь на соображениях, аналогичных тем, которые мы использовали при выводе соотношения (2.31), разделим каждую траекторию на две части: часть, которая относится к моментам времени, предшествовавшим моменту $t = s$, и часть, которая соответствует более позднему времени.

Для конкретности предположим, что каждая траектория проходит через точку x_c именно в этот момент времени $t = s$. Далее мы проинтегрируем по всем значениям x_c . Если точку $x_c(s)$ обозначить через c (т. е. положить $s = t_c$), то сумму по всем таким траекториям можно записать как $K_0(b, c) K_0(c, a)$. Это означает, что функционал $F(s) = F(t_c)$ можно представить в виде

$$F(t_c) = \int_{-\infty}^{\infty} K_0(b, c) V(x_c, t_c) K_0(c, a) dx_c. \quad (6.10)$$

Подстановка этого выражения в соотношение (6.8) дает

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b \int_{-\infty}^{\infty} K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) dx_c dt_c, \quad (6.11)$$

где $V(c) = V(x_c, t_c)$.

Пределы интегрирования по x здесь положены равными $\pm \infty$. В практических задачах эти пределы обычно определяются видом потенциала, который в большинстве случаев спадает до нуля при очень больших значениях x , или свойствами примененных установок, которые ограничивают область изменения x .

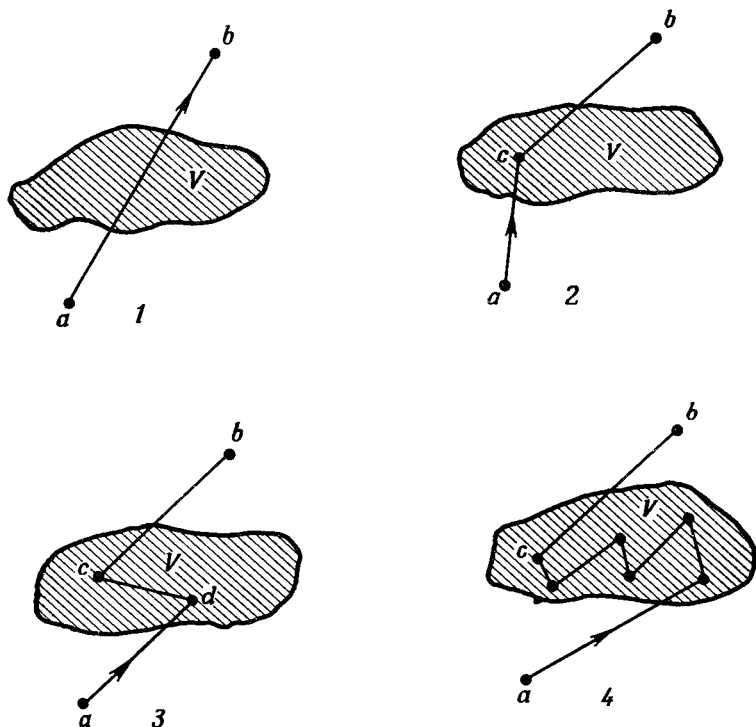
Интерпретация членов ряда. Чтобы лучше понять физический смысл очень важного и полезного соотношения (6.11), мы специально остановимся на его интерпретации. Назовем процесс взаимодействия между потенциальным полем и частицей *рассеянием*; так, мы будем говорить, что частица рассеивается на потенциале и что *амплитуда такого рассеяния на единицу объема и единицу времени равна* $-(i/\hbar) V$.

Учитывая это определение, мы можем интерпретировать ядро K_V следующим образом. Это ядро представляет собой, очевидно, сумму, взятую по всем альтернативным путям, по которым частица может попасть из точки a в точку b . Эти возможности следующие:

- 1) частица может вообще не рассеяться [$K_0(b, a)$],
- 2) частица может рассеяться один раз [$K_1(b, a)$],
- 3) частица может рассеяться дважды [$K_2(b, a)$] и т. д.

В соответствии с такой интерпретацией на фиг. 6.2 изображены различные траектории частицы.

Заметим, что каждая из перечисленных выше альтернатив в свою очередь является суммой альтернатив¹⁾. Рассмотрим, например, ядро $K^{(1)}(b, a)$, описывающее однократное рассеяние. Этому ядру соответствует, в частности, следующая альтернативная траектория: частица начинает двигаться из точки a , движется



Фиг. 6.2. Различные случаи рассеяния.

В случае 1 частица под действием потенциала V движется от точки a до точки b , не рассеиваясь. Такое движение описывается амплитудой $K_0(b, a)$. В случае 2 частица в своем движении под действием потенциала V испытывает один акт рассеяния в точке c . Этому соответствует амплитуда $K^{(1)}(b, a)$. В случае 3 частица рассеивается дважды [амплитуда $K^{(2)}(b, a)$], а в случае 4 — n раз, причем последнее рассеяние происходит в точке c . Полная амплитуда, описывающая движение частицы из точки a в точку b при любом числе рассеяний, является суммой $K_0 + K^{(1)} + K^{(2)} + \dots + K^{(n)} + \dots$.

свободно до точки x_c ($t_c = c$), где она рассеивается на потенциале $V(c)$, после чего снова движется как свободная частица из точки c до конечной точки b . Амплитуда, соответствующая такой траек-

¹⁾ Поскольку даже однократное рассеяние может происходить в различных точках C , суммирование по всем альтернативам является совершенно необходимым. — Прим. перев.

тории, равна

$$K_0(b, c) \left[-\frac{i}{\hbar} V(c) dx_c dt_c \right] K_0(c, a). \quad (6.12)$$

(Следует напомнить, что, согласно используемой нами договоренности, можно проследить за движением частицы, читая эту формулу в обратном порядке, т. е. справа налево.)

Структура амплитуды (6.12) согласуется с правилом, сформулированным в § 5 гл. 2, а именно амплитуды вероятности последовательных во времени событий перемножаются. В соответствии с равенством (6.11) полное выражение для ядра $K^{(1)}$ получается сложением всех таких альтернатив, т. е. интегрированием по переменным x_c и t_c .

С помощью этих рассуждений мы можем сразу написать ядро $K^{(2)}$ для двухкратного рассеяния в виде

$$K^{(2)}(b, a) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int \int K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) \times \\ \times V(d) K_0(d, a) d\tau_c d\tau_d, \quad (6.13)$$

где $d\tau = dx dt$. Эта формула, будучи прочитана справа налево, означает следующее: частица движется свободно от точки a до точки d и здесь рассеивается на потенциале, который в этой точке равен $V(d)$. Затем частица снова движется свободно от точки d до точки c , где она рассеивается на потенциале $V(c)$. После чего частица движется от точки c к точке b опять как свободная частица. Мы суммируем по всем альтернативам, т. е. по всем пространственным точкам и моментам времени, где может произойти такое рассеяние.

Здесь мы молчаливо предполагали, что $t_c > t_d$. Чтобы избежать усложнений, связанных с явным введением этого предположения в каждом примере, будем пользоваться условием, введенным ранее в гл. 4 [см. соотношение (4.28)], и предполагать, что

$$K(b, a) = 0 \quad \text{для} \quad t_b < t_a. \quad (6.14)$$

Тогда равенство (6.13) будет выполняться без каких-либо ограничений во всей области интегрирования по переменным t_c и t_d .

Читателя может заинтересовать вопрос, что произошло с коэффициентом $1/2$, который, как легко видеть, был в формуле (6.7) и кажется пропущенным в соотношении (6.13). Отметим, что в формуле (6.13) область интегрирования по переменной t_d по-прежнему заключена в пределах от t_a до t_b . Однако область интегрирования по переменной t_c ограничена тем, что точка t_c обязана теперь находиться между точками t_d и t_b вследствие условия (6.14). Такое ограничение уменьшает величину интеграла ровно на половину. Чтобы увидеть это более ясно, представим

двойной интеграл (6.7) в виде

$$\begin{aligned} & \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} V[x(s), s] V[x(s'), s'] ds' ds = \\ & = \int_{t_a}^{t_b} \int_s^{t_b} V[x(s), s] V[x(s'), s'] ds' ds + \\ & + \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^s V[x(s), s] V[x(s'), s'] ds' ds. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Первый член в правой части этого соотношения удовлетворяет ограничениям, накладываемым условием (6.14). После изменения порядка интегрирования второй член справа можно записать как

$$\int_{t_a}^{t_b} \int_{s'}^{t_b} V[x(s), s] V[x(s'), s'] ds ds'. \quad (6.16)$$

Если в этом выражении поменять местами переменные s и s' , то величина интеграла не изменится. Следовательно, первый и второй члены в правой части соотношения (6.15) равны и каждый из них есть половина величины первоначального интеграла. С помощью аналогичных соображений в выражении для ядра $K^{(n)}$ получается коэффициент $1/n!$

Задача 6.1. Допустим, что потенциал может быть записан как сумма $U + V$, где V мало по сравнению с U . Далее, пусть ядро, описывающее движение под действием одного из этих потенциалов, вычислимо (например, потенциал U может быть квадратичным по переменной x и не зависеть от времени). Покажите, что движение под действием суммарного потенциала $U + V$ описывается соотношениями (6.4), (6.11), (6.13) и (6.14), если ядро K_0 заменить ядром K_U , соответствующим движению только лишь под действием потенциала U . Таким образом, V можно рассматривать как возмущение потенциала U . Можно сказать, что $-(i/\hbar) V$ представляет собой амплитуду вероятности рассеяния, обусловленного возмущающей частью потенциала (в расчете на единицу объема и на единицу времени). Ядро K_U — амплитуда, описывающая движение системы под действием невозмущенного потенциала U .

Задача 6.2. Предположим, что система состоит из двух частиц, взаимодействие которых описывается потенциалом $V(x, y)$, где x — координата первой, а y — координата второй частицы [ср.

§ 8 гл. 3 и выражение (3.75)]. Если не учитывать этого взаимодействия, то движение частиц будет свободным.

Если потенциал равен нулю, то K_V — просто произведение двух ядер, соответствующих свободным частицам. Используя этот факт, получите ряд теории возмущений для величины $K_V(x_b, y_b, t_b; x_a, y_a, t_a)$. Спрашивается, какими физическими соображениями диктуются различные члены этого ряда?

§ 2. Интегральное уравнение для ядра K_V

Прежде чем применить результаты предыдущих параграфов к изучению конкретных примеров, получим некоторые общие математические соотношения, включающие ядра и волновые функции для систем, движущихся в потенциальном поле. Используя предыдущие результаты, можно записать соотношение (6.4) в виде

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) d\tau_c + \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int \int K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) d\tau_c d\tau_d + \dots \quad (6.17)$$

Это выражение можно представить и в другом виде:

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(b, c) V(c) [K_0(c, a) - \\ - \frac{i}{\hbar} \int K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) d\tau_d + \dots] d\tau_c. \quad (6.18)$$

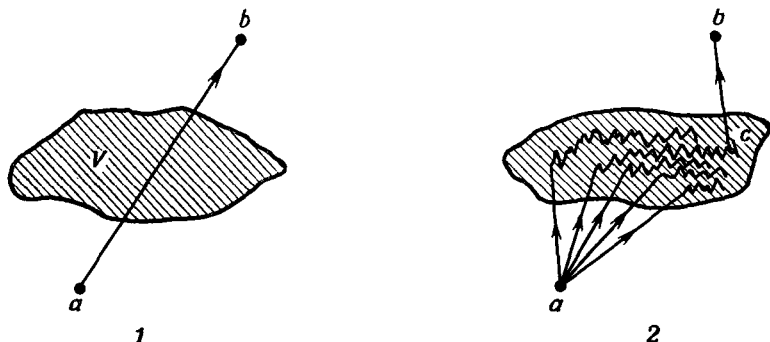
Выражение в скобках имеет такой же вид, как и правая часть соотношения (6.17); суммирование в обоих случаях производится по бесконечному числу членов. Это означает, что ядро K_V можно записать как

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(b, c) V(c) K_V(c, a) d\tau_c, \quad (6.19)$$

что является точным выражением. Мы получили интегральное уравнение, определяющее ядро K_V , в случае, когда известно ядро K_0 (заметим, что для ситуации, описанной в задаче 6.1, ядро K_0 нужно заменить на K_U). Следовательно, проблема интегрирования по траекториям сведена нами к решению интегрального уравнения.

Физически этот результат можно интерпретировать следующим образом. Полная амплитуда перехода системы из точки a в точку b посредством любого числа актов рассеяния может быть представлена как сумма двух амплитуд. Первая из них — амплитуда вероятности того, что движение частицы происходит без рас-

сеяния (ядро K_0). Вторая — амплитуда перехода, происходящего с одним или большим числом рассеяний. Эта амплитуда выражается последним членом соотношения (6.19). Точка c здесь может мыслиться как точка, в которой происходит последнее рассеяние. Таким образом, система движется от точки a до точки c в потенциальном поле, и это ее движение точно описывается ядром $K_V(c, a)$. Затем



Фиг. 6.3. Общий случай.

В случае 1 частица, на которую действует потенциал V , движется от точки a до точки b как свободная; это описывается амплитудой $K_0(b, a)$. В случае 2 частица рассеивается на потенциале V один или большее число раз, причем последнее рассеяние происходит в точке c . Движение из точки a в точку c описывается ядром $K_V(c, a)$, а из точки c в точку b — ядром $K_0(b, c)$. Комбинация этих двух случаев, в которой учтены все положения точки c , охватывает все возможности и дает для $K_V(b, a)$ уравнение (6.19).

в точке c происходит последнее рассеяние, после чего система совершает переход как свободная (без рассеяний) в точку b . Эта часть движения описывается ядром K_0 . Все сказанное выше иллюстрируется фиг. 6.3.

Последнее рассеяние может произойти в любой точке пространства и времени в промежутке между точками a и b , поэтому амплитуда для сложного движения, представленная подынтегральным выражением в последнем члене формулы (6.19), должна быть проинтегрирована по всем возможным положениям точки c .

Задача 6.3. Для свободной частицы уравнение (4.29) сводится к следующему:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t_b} K_0(b, a) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_b^2} K_0(b, a) = i\hbar \delta(t_b - t_a) \delta(x_b - x_a). \quad (6.20)$$

Используя это уравнение и уравнение (6.19), покажите, что ядро K_V удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t_b} K_V(b, a) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_b^2} K_V(b, a) + V(b) K_V(b, a) = i\hbar \delta(x_b - x_a) \delta(t_b - t_a). \quad (6.21)$$

§ 3. Разложение волновой функции

В § 4 гл. 3 мы ввели понятие волновой функции и рассмотрели некоторые соотношения, связывающие волновые функции и ядра. Соотношение (3.42) показывает, каким образом с помощью ядра, описывающего движение системы в промежутке между двумя моментами времени t_a и t_b , можно получить волновую функцию для момента t_b , если известна волновая функция для более раннего момента времени t_a .

Здесь это уравнение нам будет удобно записать в виде

$$\psi(b) = \int K_V(b, a) f(a) dx_a, \quad (6.22)$$

где $f(a)$ — значение волновой функции в момент времени $t = t_a$ [т. е. $f(a)$ — функция точки x_a], $\psi(b)$ — волновая функция для более позднего момента времени $t = t_b$ ¹⁾. Мы предполагаем также, что в промежутке между этими двумя моментами времени система движется в потенциальном поле V , где ее движение описывается ядром $K_V(b, a)$.

Если разложенное в ряд ядро K_V [см. формулу (6.18)] подставить в соотношение (6.22), то мы получим разложение в ряд функции $\psi(b)$. Таким образом,

$$\begin{aligned} \psi(b) = & \int K_0(b, a) f(a) dx_a - \\ & - \frac{i}{\hbar} \int \int K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) d\tau_c f(a) dx_a + \dots \end{aligned} \quad (6.23)$$

Первый член этого разложения дает волновую функцию для момента времени t_b в предположении, что между t_a и t_b система остается свободной (или невозмущенной, в последнем случае ядро K_0 нужно заменить ядром K_U). Обозначим этот член через φ

$$\varphi(b) = \int K_0(b, a) f(a) dx_a. \quad (6.24)$$

Используя это определение, ряд (6.23) можно переписать теперь как

$$\begin{aligned} \psi(b) = & \varphi(b) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(b, c) V(c) \varphi(c) d\tau_c + \\ & + \frac{i^2}{\hbar^2} \int \int K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) \varphi(d) d\tau_c d\tau_d + \dots \end{aligned} \quad (6.25)$$

Записанный в таком виде ряд теории возмущений называется *борновским разложением функции ψ* . Если ограничиться только

¹⁾ Заметим, что наше условие $K_0(b, a) = 0$ для $t_b < t_a$ приводит к тому, что соотношение (6.22) становится непригодным, если $t_b < t_a$, однако в области таких значений t мы не будем пользоваться этим соотношением.

первыми двумя членами (т. е. учесть лишь первый порядок разложения по V), то получим *первое борновское приближение*. Оно соответствует единичному рассеянию на потенциале V . Это рассеяние происходит в точке c . До этой точки движение системы является свободным и описывается функцией $\varphi(c)$, после рассеяния система снова движется как свободная от точки c до точки b и описывается ядром $K_0(b, c)$. Интеграл должен быть взят по всем возможным точкам, в которых происходит рассеяние. Когда используются три члена ряда (т. е. учитывается второй порядок по V), результат называется *вторым борновским приближением* и т. д.

Задача 6.4. Используя соображения, подобные тем, что привели нас к уравнению (6.19), покажите, что волновая функция $\psi(b)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\psi(b) = \varphi(b) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(b, c) V(c) \psi(c) d\tau_c. \quad (6.26)$$

Это интегральное уравнение эквивалентно уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = 0. \quad (6.27)$$

Ограничившись одномерным случаем, покажите, как получить уравнение Шредингера из интегрального уравнения (6.27).

§ 4. Рассеяние электрона на атоме

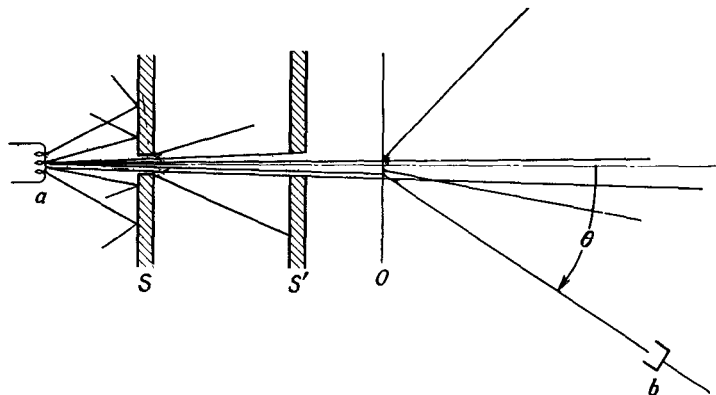
Математическое рассмотрение. Идею метода и формулы теории возмущений мы рассмотрели пока несколько формально. Чтобы выяснить физический смысл этой теории, рассмотрим теперь конкретную задачу о рассеянии быстрого электрона на атоме.

Рассмотрим эксперимент, в котором пучок электронов бомбардирует мишень из тонкой металлической фольги, а затем попадает на соответствующий счетчик, как это показано на фиг. 6.4.

Предположим, что энергия рассеивающихся частиц определяется методом измерения времени пролета. Это означает, что мы фиксируем электрон, вылетающий из источника в некоторый момент времени, скажем $t = 0$, и определяем, какова вероятность того, что он попадает в счетчик через некоторый промежуток времени, равный времени задержки T . Тогда можно непосредственно использовать наше выражение $K(b, a)$, полученное для амплитуды перехода из одного положения в другое за некоторый определенный промежуток времени.

Можно упростить задачу, предположив, что взаимодействие является настолько слабым или фольга настолько тонкой, что каждый электрон будет взаимодействовать, как правило, лишь с одним

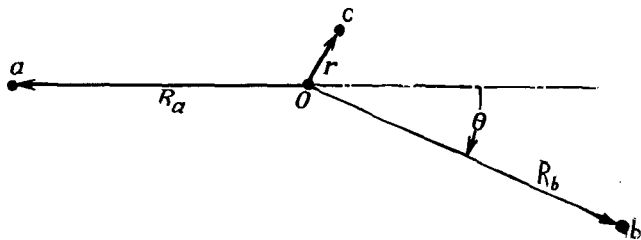
атомом. Фактически для большинства экспериментов с рассеянием это предположение является весьма реальным. Более того, в целом ряде случаев многократное рассеяние также можно анализировать на основе простого однократного рассеяния на одном



Ф и г. 6.4. Эксперимент с рассеянием электронов.

Электроны, испаряющиеся с электрода в точке a , собираются в пучок с помощью коллимирующих отверстий в экранах S и S' и бомбардируют далее мишень из тонкой фольги в точке O . Большая часть электронов проходит по прямой без рассеяния (если, конечно, их энергия достаточно велика, а мишень достаточно тонкая), но некоторые электроны отклоняются при взаимодействии с атомами мишени и рассеиваются, например, под углом θ в точку b . Если счетчик в точке b перемещать вверх и вниз, можно установить зависимость между относительным числом рассеяний и углом рассеяния θ .

атоме. Поэтому мы ограничимся рассмотрением взаимодействий между отдельными электронами и каким-то одним атомом.



Ф и г. 6.5. Геометрия задачи с рассеянием.

Электрон выходит из точки a и движется как свободная частица до точки c , где он рассеивается атомным потенциалом $V(r)$. После рассеяния он попадает в счетчик, расположенный в точке b на конце радиуса-вектора R_b , проведенного от рассеивающего центра O . В этом случае электрон будет рассеян на угол θ , отсчитываемый от начального направления пучка. Этот процесс соответствует первому борновскому приближению. Если учесть амплитуды двух актов рассеяния, то получим второе борновское приближение, и т. д.

Выберем начало координат в центре атома. Пусть в этой системе, как показано на фиг. 6.5, электроны выходят из точки a в момент времени $t = 0$. С помощью счетчика, помещенного в точку b ,

мы узнаем, достигнет ли электрон точки b в момент времени $t = T$. Будем приближенно считать, что

1) взаимодействие может быть рассмотрено в первом борновском приближении, т. е. электрон рассеивается на атоме только один раз;

2) атом может быть представлен с помощью потенциала $V(\mathbf{r})$, фиксированного в пространстве и постоянного во времени.

На самом деле атом является очень сложной системой, и взаимодействие между электроном и атомом в действительности гораздо сложнее, чем это может быть представлено простым потенциалом $V(\mathbf{r})$. Электрон может возбудить или ионизовать атом и потерять при этом часть энергии. Можно показать, однако, что когда мы рассматриваем только упругие столкновения электрона с атомом (атом после столкновения остается в том же самом энергетическом состоянии, что и до столкновения), то второе предположение будет выполняться, если выполнено первое предположение.

Пусть $\mathbf{R}_a$ и $\mathbf{R}_b$ — векторы, соединяющие центр атома с точками, в которых электрон соответственно испускается и регистрируется. В расчетах мы примем, что длина векторов $\mathbf{R}_a$ и $\mathbf{R}_b$ много больше радиуса атома. Таким образом, мы предполагаем, что атомный потенциал $V(\mathbf{r})$ становится пренебрежимо малым на расстояниях, много меньших, чем $|\mathbf{R}_a|$ и $|\mathbf{R}_b|$. Следовательно, большую часть времени пролета электрон будет двигаться как свободная частица и только вблизи начала координат он испытает действие потенциала.

Первое борновское приближение содержит два члена, из которых нас будет интересовать лишь второй. Первый член, являющийся ядром $K_0(b, a)$ для случая свободной частицы, был уже достаточно подробно нами изучен. Мы интересуемся вторым членом

$$\begin{aligned} K^{(1)}(b, a) &= -\frac{i}{\hbar} \int K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) d\tau_c = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^r \int_0^T \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (T-t)} \right]^{3/2} \left\{ \exp \left[\frac{im |\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|^2}{2\hbar (T-t)} \right] \right\} V(\mathbf{r}) \times \\ &\quad \times \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \left[\exp \left(\frac{im |\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|^2}{2\hbar t} \right) \right] d^3\mathbf{r} dt. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Через $\mathbf{r}$ мы обозначили здесь вектор, соединяющий начало координат с точкой c , $d^3\mathbf{r}$ — произведение дифференциалов всех компонент вектора $\mathbf{r}$. Интегрирование по переменной t дает

$$\begin{aligned} K^{(1)}(b, a) &= -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{5/2} T \int_0^r \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right) \times \\ &\quad \times \left\{ \exp \left[\frac{im}{2\hbar T} (r_a + r_b)^2 \right] \right\} V(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (6.29)$$

где $r_a = |\mathbf{R}_a - \mathbf{r}|$ и $r_b = |\mathbf{R}_b - \mathbf{r}|$ (см. приложение). Для этих величин мы можем написать

$$r_a = R_a \left(1 - \frac{2\mathbf{R}_a \cdot \mathbf{r}}{R_a^2} + \frac{r^2}{R_a^2} \right)^{1/2} \approx R_a + \mathbf{i}_a \cdot \mathbf{r}, \quad (6.30)$$

$$r_b = R_b \left(1 - \frac{2\mathbf{R}_b \cdot \mathbf{r}}{R_b^2} + \frac{r^2}{R_b^2} \right)^{1/2} \approx R_b - \mathbf{i}_b \cdot \mathbf{r}, \quad (6.31)$$

где $\mathbf{i}_a$ и $\mathbf{i}_b$ — единичные векторы соответственно в направлениях векторов $\mathbf{R}_a$ и $\mathbf{R}_b$ (т. е. $\mathbf{i}_a = -\mathbf{R}_a/R_a$, где $R_a = |\mathbf{R}_a|$). При выводе приближенных соотношений (6.30) и (6.31) мы воспользовались тем фактом, что величина R_a намного больше тех расстояний $|\mathbf{r}|$, на которых нельзя пренебрегать потенциалом $V(\mathbf{r})$.

Члены первого порядка по r необходимо удерживать лишь в экспоненциальном множителе, поскольку этот множитель особенно чувствителен к малым изменениям фазы. Поэтому мы запишем

$$(r_a + r_b)^2 \approx (R_a + R_b)^2 + 2(R_a + R_b)(\mathbf{i}_a \cdot \mathbf{r} - \mathbf{i}_b \cdot \mathbf{r}). \quad (6.32)$$

Используя эти приближения, ядро $K^{(1)}$ можно теперь представить в виде

$$\begin{aligned} K^{(1)}(b, a) \approx & -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{5/2} T \left(\frac{1}{R_a} + \frac{1}{R_b} \right) \times \\ & \times \left\{ \exp \left[\frac{im}{2\hbar T} (R_a + R_b)^2 \right] \right\} \times \\ & \times \int \left\{ \exp \left[\frac{im}{\hbar T} (R_a + R_b)(\mathbf{i}_a \cdot \mathbf{r} - \mathbf{i}_b \cdot \mathbf{r}) \right] \right\} V(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Физическая интерпретация. Из анализа соотношения (6.33) мы можем получить некоторые физические характеристики движения. За промежуток времени T электрон проходит полное расстояние, равное $R_a + R_b$. Следовательно, его скорость в течение этого промежутка времени составляет $u = (R_a + R_b)/T$, его энергия равна $mu^2/2$, а импульс равен mu . При этом мы предполагаем, что энергия электрона не изменяется в процессе рассеяния. То, что эти значения скорости, энергии и импульса совместимы друг с другом, можно проверить, рассмотрев вид экспоненциального множителя перед интегралом в формуле (6.33). Фаза этого экспоненциального фактора равна $im[(R_a + R_b)^2/2\hbar T]$, поэтому частота, определяемая производной этой фазы по переменной T , составляет

$$\omega = \frac{m}{2\hbar} \frac{(R_a + R_b)^2}{T^2}. \quad (6.34)$$

Если скорость u определена так, как это сделано выше, то энергия будет равна $mu^2/2$ [ср. соотношение (3.15)].

Дифференцирование фазы по переменной R_b дает волновое число в точке b

$$k = \frac{m}{\hbar} \frac{R_a + R_b}{T}, \quad (6.35)$$

а это значит, что величина импульса равна mi [ср. соотношение (3.12)].

Задача 6.5. Интеграл по переменной t в формуле (6.28) можно аппроксимировать, используя метод стационарной фазы. Рассмотрите этот метод на примере данного интеграла; покажите, что наибольший вклад в интеграл дают значения t из области, близкой к точке $t = R_a/u$ и представляющей собой время, за которое электрон должен был бы достигнуть центра атома, если бы он двигался по классическим законам.

Используя определение скорости электрона $u = (R_a + R_b)/T$, запишем вектор импульса входящей частицы p_a в виде

$$p_a = mi i_a, \quad (6.36)$$

а вектор импульса выходящей частицы p_b — как

$$p_b = mi i_b. \quad (6.37)$$

Тогда соотношение (6.33) можно представить в виде

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{5/2} \frac{u}{T^{1/2} R_a R_b} \left[\exp \left(\frac{im}{2\hbar} u^2 T \right) \right] \times \\ \times \int^r \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_a - p_b) \cdot r \right] \right\} V(r) d^3 r. \quad (6.38)$$

Обозначим далее изменение (или передачу) импульса через

$$q = p_a - p_b$$

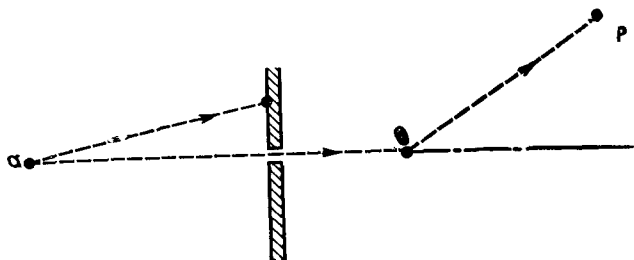
и введем величину

$$v(q) = \int^r e^{(i/\hbar) q \cdot r} V(r) d^3 r. \quad (6.39)$$

Вероятность того, что электрон достигнет точки b , дается квадратом модуля ядра $K_V(b, a)$ и, следовательно, будет зависеть в основном от первого члена разложения этого ядра, т. е. от величины $K_0(b, a)$, которая, по-видимому, настолько велика, что полностью перекрывает малый возмущающий член $K^{(1)}(b, a)$.

Поэтому в большинстве экспериментов по рассеянию обычно коллимируют входящий пучок соответствующими экранами, с тем чтобы те электроны, которые не рассеиваются на атомах мишени, не выходили бы за пределы ограниченной области вдоль некоторого направления, как это показано на фиг. 6.6. Конечно

на таких коллимирующих экранах будет происходить дифракция (как это уже обсуждалось нами в гл. 3, § 2 и 3), и вне области центрального пучка будет наблюдаться некоторое число нерассеянных электронов. Однако коллиматоры можно установить таким образом, чтобы для точек, достаточно удаленных от оси коллимации, число дифрагировавших на коллиматоре электронов было бы очень мало по сравнению с числом электронов, рассеянных на атомах мишени.



Ф и г. 6.6. Принципиальная схема фокусировки для исключения влияния члена нулевого порядка в точке b .

В этом случае из точки a в точку b с заметной вероятностью могут прийти лишь те электроны, которые испытывают хотя бы одно рассеяние. Поэтому член нулевого порядка в разложении $K_V(b, a)$ в ряд теории возмущений будет вносить лишь пренебрежимо малый вклад и его можно отбросить. Вклад возникает за счет члена первого порядка $K^1(b, a)$.

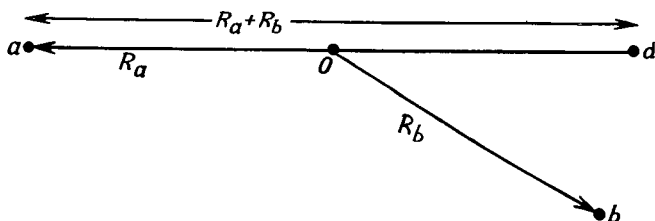
Тогда вероятность обнаружения электрона в такой области, по крайней мере в первом порядке теории возмущений, определяется только квадратом модуля ядра $K^{(1)}(b, a)$. Используя соотношения (6.38) и (6.39), запишем эту вероятность как

$$\frac{P(b)}{\text{ед. объема}} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^5 \frac{u^2}{TR_a^2 R_b^2} |\nu(\mathbf{q})|^2. \quad (6.40)$$

Характерные особенности атомного потенциала и зависимость ядра от относительных направлений векторов R_a и R_b заключены в этой формуле в множителе $\nu(\mathbf{q})$. Этот множитель совершенно не зависит от размеров экспериментального устройства; их влияние учитывается остальной частью формулы (6.40). Например, множитель $1/R_a^2$, как легко видеть, обусловлен тем, что вероятность столкновения электрона с атомом убывает обратно пропорционально R_a^2 . Может показаться, что в применении к рассматриваемому эксперименту это утверждение спорно из-за наличия коллиматоров. Однако эффект коллимации пренебрежимо мал на расстояниях порядка атомных размеров; по отношению к атому-мишени пучок налетающих электронов состоит из частиц, изотропно испускаемых некоторым точечным источником. Точно так же изотропно по всем направлениям от рассеивающего атома раз-

летаются и рассеянные электроны. Поэтому отнесенная к единице объема вероятность регистрации электрона в точке b изменяется обратно пропорционально R_b^3 . Поскольку наиболее интересные свойства рассматриваемого эксперимента связаны с функцией $v(\mathbf{q})$, мы уделим этой функции особое внимание в следующем параграфе.

Часть сомножителей в формуле (6.40) определяется выбором способа нормировки нашего ядра. Поэтому формулу (6.40) более удобно рассматривать и представлять в виде некоторого отношения



Ф и г. 6.7. Сравнение точек b и d .

Если точки b и d находятся на одинаковых расстояниях от точки O , равных R_b , то различие в числе электронов, попадающих в эти точки, будет обусловлено лишь процессом рассеяния. Точка d лежит на пути движения нерассеявшихся электронов. Отношение числа электронов, попавших в точку b , к числу электронов, которые достигли бы точки d , если бы на их пути не было рассеивающего центра, равно вероятности рассеяния в точку b .

вероятностей. Сравним вероятность обнаружения рассеянной частицы в точке b с вероятностью ее обнаружения в точке d , если точки b и d расположены за атомом на одинаковом расстоянии $R_a + R_b$ от источника (фиг. 6.7). Другими словами, рассчитаем отнесенную к единице объема вероятность $P(d)$ так, как если бы на пути частицы не было ни одного атома. Это даст нам величину $|K_0(d, a)|^2$, т. е.

$$\frac{P(d)}{\text{ед. объема}} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^3 \frac{u^2}{T(R_a + R_b)^2}, \quad (6.41)$$

так что

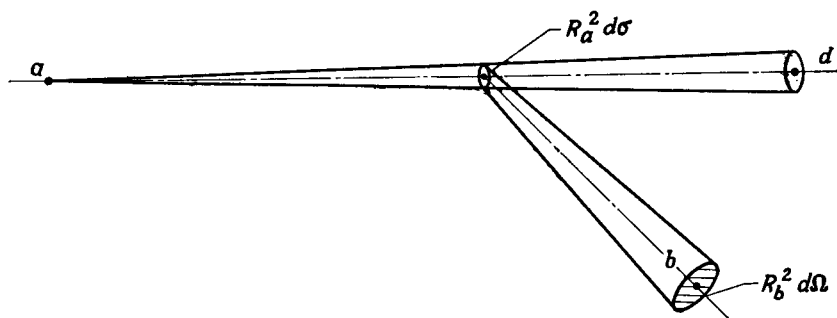
$$\frac{P(b)}{P(d)} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |v(\mathbf{q})|^2 \frac{(R_a + R_b)^2}{R_a^2 + R_b^2}. \quad (6.42)$$

В § 5 мы дадим геометрическую интерпретацию этого отношения и более детально рассмотрим функцию $V(\mathbf{q})$.

Эффективное сечение рассеяния. Характеристики атома в экспериментах с рассеянием удобно описывать с помощью понятия *эффективного сечения рассеяния*¹⁾. Привлекательность такого

¹⁾ В литературе вместо термина «эффективное сечение» часто используются также термины «поперечное сечение» или «эффективное поперечное сечение». Все эти термины совершенно эквивалентны. — *Прим. ред.*

подхода обусловлена нашей привычкой к представлениям классической физики. Эффективное сечение σ определяется как та эффективная площадь атома-мишени (в классическом смысле этого слова), которую должен иметь перед собой электрон, чтобы рассеяться в единичный телесный угол. Этот телесный угол измеряется относительно сферы, центр которой совпадает с центром



Фиг. 6.8. Частицы бомбардируют площадку $d\sigma$ мишени и отклоняются на угол θ , попадая на площадку, измеряемую телесным углом $d\Omega$.

Если бы не произошло ни одного соударения, все частицы попали бы в точку d . Вместо этого они попадают в точку b , разбрасываясь по площади $R_b^2 d\Omega$. Вероятность обнаружить частицу в точке d обратно пропорциональна площади, по которой распределится пучок в точке d .

Аналогично вероятность обнаружения частицы в точке b обратно пропорциональна площади $R_b^2 d\Omega$, по которой распределится пучок рассеявшихся частиц, когда они долетят до точки b . Если взять отношение этих площадей, то получим обратную величину отношения соответствующих вероятностей. С этой точки зрения мы говорим, что все частицы, которые попадают на мишень площадью $d\sigma$, рассеиваются на угол θ . В действительности, конечно, только немногие из частиц, попадающих на мишень, вообще рассеиваются и только часть из них — на угол θ . Итак, элемент площади $d\sigma$, который мы использовали в наших расчетах, есть **эффективное** поперечное сечение рассеяния на угол θ , отнесенное к единице телесного угла $d\Omega$, в которой рассеиваются частицы.

атома. Эффективное сечение будет поэтому функцией угла рассеяния, т. е. функцией угла между векторами R_a и R_b . С помощью такой классической модели мы можем выразить вероятность попадания электрона в заданную точку b .

Если частицы, вылетающие из начала координат, сталкиваются на расстоянии R_a с мишенью площадью $d\sigma$, то эти частицы уже не попадут в область d , где они имели бы разброс в круге с площадью $[(R_a + R_b)/R_a]^2 d\sigma$. Вместо этого они полетят в телесном угле $d\Omega$ в направлении b и будут, следовательно, иметь разброс по площади $R_b^2 d\Omega$, как показано на фиг. 6.8. Поэтому отношение вероятности попадания частицы в точку b к вероятности ее попадания в точку d , на пути к которой не было соударений, равно обратному отношению этих площадей:

$$\frac{P(b)}{P(d)} = \frac{(R_a + R_b)^2 d\sigma / R_a^2}{R_b^2 d\Omega}. \quad (6.43)$$

Сравнивая выражения (6.42) и (6.43), мы видим, что эффективное сечение рассеяния в единицу телесного угла есть

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |v(\mathbf{q})|^2. \quad (6.44)$$

Основное преимущество такого применения понятия эффективного сечения по сравнению с рассмотренным выше соотношением (6.40) заключается в том, что выражение (6.44) не зависит от конкретных экспериментальных условий. Поэтому эффективные сечения, полученные из разных экспериментов, можно сравнивать непосредственно, тогда как для вероятностей, отнесенных к единице объема, такое сравнение невозможно.

Следует подчеркнуть, что понятие эффективной мишени является чисто классическим и представляет собой лишь удобный способ рассмотрения вероятностей рассеяния. Между величиной эффективного сечения и размерами рассеивающего атома не существует прямой связи и нельзя представлять себе, что механизм рассеяния локализован в области именно таких размеров. Например, тень, которая при классическом рассмотрении должна появиться позади мишени, на самом деле вовсе не будет обладать свойствами классической тени с резкими границами; так как мы имеем дело с волновым процессом, то эта тень будет искажена дифракцией.

Различные выражения для атомного потенциала. На примере конкретных задач здесь показаны результаты, полученные при различных предположениях о виде атомного потенциала $V(r)$.

Задача 6.6. Пусть мы имеем потенциал, соответствующий центральным силам, т. е. $V(\mathbf{r}) = V(r)$. Покажите, что функция $v(\mathbf{q})$ может быть записана в виде

$$v(\mathbf{q}) = v(q) = \frac{4\pi\hbar}{q} \int_0^\infty r \left(\sin \frac{qr}{\hbar} \right) V(r) dr. \quad (6.45)$$

Если допустить, что $V(r)$ является кулоновским потенциалом Ze^2/r , то интеграл в выражении для $v(q)$ оказывается осциллирующим вблизи верхнего предела, т. е. при $r \rightarrow \infty$. Тем не менее такой интеграл можно сделать сходящимся с помощью искусственного введения в подынтегральное выражение множителя $e^{-\varepsilon r}$ и после вычисления интеграла перейти к пределу при $\varepsilon \rightarrow 0$. Используя этот прием, покажите, что в итоге получается сечение Резерфордского рассеяния

$$\sigma_R = \frac{4Ze^4m^2}{q^4} = \frac{Ze^4}{16(mu^2/2) [\sin(\theta/2)]^4}, \quad (6.46)$$

где e — заряд электрона,

$$q = 2p \sin \frac{\theta}{2} = 2mu \sin \frac{\theta}{2}, \quad (6.47)$$

а θ — угол между векторами $\mathbf{i}_a$ и $\mathbf{i}_b$.

Результат, полученный в задаче 6.6, случайно оказывается точным в том смысле, что первое борновское приближение дает точную величину вероятности рассеяния на кулоновском потенциале. Это не означает, что члены высшего порядка обратятся в нуль; дело в том, что они вносят вклад лишь в фазу амплитуды рассеяния. Поскольку вероятность равна квадрату модуля амплитуды, она не зависит от фазы. Таким образом, первое борновское приближение дает правильное значение вероятности рассеяния, но не является точным выражением для амплитуды. Случай кулоновского рассеяния любопытен еще и по ряду других причин. В частности, строго классическое (т. е. сделанное в предположении, что электрон ведет себя как заряженная точечная масса) исследование этого рассеяния приводит к тому же самому результату.

Задача 6.7. Предположим, что потенциал $V(\mathbf{r})$ создается зарядом, распределенным с плотностью $\rho(\mathbf{r})$, так что

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 4\pi e \rho(\mathbf{r}). \quad (6.48)$$

Пусть плотность $\rho(\mathbf{r})$ спадает до нуля при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Умножая соотношение (6.48) на $\exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}/\hbar)]$ и дважды интегрируя по переменной $\mathbf{r}$, покажите что функция $v(\mathbf{q})$ может быть следующим образом выражена через плотность ρ :

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi\hbar^2 e^2}{q^2} \int \mathbf{r} e^{(i/\hbar)(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})} \rho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (6.49)$$

Атом можно описать, используя понятие плотности заряда. В области атомного ядра эта плотность заряда предполагается сингулярной, так что ее можно представить в виде δ -функции от расстояния r с коэффициентом Z , равным заряду ядра. Если ρ_e — плотность атомных электронов, то функция $v(\mathbf{q})$ в этом случае запишется как

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi\hbar^2 e^2}{q^2} \left[Z - \int \rho_e(\mathbf{r}) e^{(i/\hbar)\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \right]. \quad (6.50)$$

Величину в скобках принято называть атомным *формфактором*. (Заметим, что точно с таким же формфактором мы встречаемся при изучении рассеяния рентгеновских лучей. Действительно, в теории рассеяния рентгеновских лучей доказано, что в этом случае основную роль играют атомные электроны, а не ядро.

Поэтому формфактор для рентгеновских лучей будет тем же самым, что и в случае рассеяния электронов на атоме, если не считать того, что для рентгеновских лучей не нужно учитывать фактор Z .)

В атоме потенциал изменяется по кулоновскому закону лишь при очень малых радиусах. С увеличением радиуса атомные электроны начинают постепенно экранировать (компенсировать) электрический заряд ядра до тех пор, пока при достаточно больших значениях r потенциал не обратится в нуль. В очень грубом приближении эффект экранировки атомными электронами можно оценить с помощью формулы

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} e^{-(r/a)}. \quad (6.51)$$

Через a в этой формуле обозначен радиус атома. Заметим, что это не тот внешний радиус атома, которым пользуются химики; здесь $a = a_0/Z^{1/3}$, где $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0,528 \text{ \AA}$.

Задача 6.8. Покажите, что для потенциала (6.51)

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{q^2 + (\hbar/a)^2} \quad (6.52)$$

и, следовательно,

$$\sigma = Z^2 e^4 \left\{ \frac{\mu^2}{2} \left[4 \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{(pa)^2} \right] \right\}^{-2}. \quad (6.53)$$

Полное эффективное сечение σ_T определится как интеграл от сечения σ по поверхности единичной сферы, т. е.

$$\sigma_T = \int_0^{4\pi} \sigma d\Omega. \quad (6.54)$$

Покажите, что это сечение имеет вид

$$\sigma_T = \pi a^2 \frac{Z^2 e^4}{(2u\hbar)^2} \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2}{(2pa)^2}}. \quad (6.55)$$

Задача 6.9. Пусть мы хотим учесть тот факт, что атомное ядро имеет конечный радиус

$$r = 1,2 \cdot 10^{-13} \times (\text{массовое число})^{1/3} \text{ см} \quad (6.56)$$

в предположении, что заряд ядра распределен приблизительно равномерно внутри сферы такого радиуса. Спрашивается, как это предположение повлияет на эффективное сечение рассеяния электронов на атоме в области больших передач импульса q ?

Покажите, каким образом отсюда может быть определен радиус ядра. Насколько велика должна быть величина импульса налетающих электронов p , чтобы стало заметным влияние структуры

атомного ядра? Какие углы, большие или малые, следует при этом измерять более точно и почему?

З а м е ч а н и е. В эксперименте такого рода требуются настолько большие импульсы электронов, что для нахождения энергии фактически нужно пользоваться релятивистской формулой $E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} - mc^2$, поэтому, строго говоря, для описания взаимодействия мы уже не имеем права применять нерелятивистские формулы. Однако соотношение между импульсом и длиной волны и между энергией и частотой не изменяются при переходе в релятивистскую область. Поскольку это именно та длина волны, которая определяет разрешающую силу такого «электронного микроскопа», то использование (без конкретного вычисления импульса) нерелятивистских формул является вполне законным.

Задача 6.10. Рассмотрим двухатомную молекулу, состоящую из атомов A и B , центры которых задаются векторами a и b . Используя борновское приближение, покажите, что амплитуда рассеяния электрона на такой молекуле

$$K^{(1)} = e^{(i/\hbar)\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}} f_A(\mathbf{q}) + e^{(i/\hbar)\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}} f_B(\mathbf{q}), \quad (6.57)$$

где f_A и f_B — амплитуды рассеяния электрона на отдельных атомах при допущении, что каждый из этих атомов располагался бы в начале системы координат. Межатомные связи слабо влияют на распределение заряда вокруг ядер (за исключением очень легких атомов, таких, как водород), так как силы этих связей действуют лишь на самые внешние электроны атомных оболочек.

Используя соотношение (6.57), покажите, что вероятность рассеяния при заданном значении передаваемого импульса q пропорциональна сумме $f_A^2 + f_B^2 + 2f_A f_B \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{d})$, где $\mathbf{d} = \mathbf{a} - \mathbf{b}$.

Вычисленные в борновском приближении амплитуды f являются действительными величинами и применимы для тех энергий электронов (порядка 1 кэв), которые обычно используются в дифракционных опытах с молекулами. Однако если молекула состоит из очень тяжелых атомов, таких, как уран, то атомный потенциал V становится настолько большим, что борновское приближение оказывается уже недостаточно точным для описания экспериментов. В этом случае необходимо внести небольшие поправки.

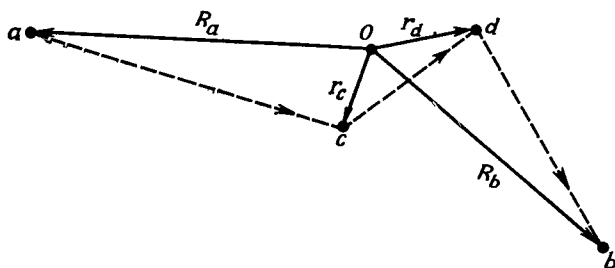
Задача 6.11. Предположим, что молекулы ориентированы совершенно случайным образом. Покажите, что эффективное сечение рассеяния электронов, усредненное по совокупности таких молекул, пропорционально сумме $f_A^2 + f^2 + 2f_A f_B |\sin(\mathbf{q} \times \mathbf{d})/(\mathbf{q} \cdot \mathbf{d})|$. Как обобщить этот результат на случай многоатомных молекул?

Все эти результаты лежат в основе электронной дифракционной техники, позволяющей определять форму различных молекул.

Задача 6.12. В предположении о независимости потенциала $V(\mathbf{r})$ от времени покажите, что интегрирование по времени в выражении для ядра $K^{(2)}(b, a)$, описывающем рассеяние во втором порядке теории возмущений, приводит к формуле

$$K^{(2)}(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2} \int_{\mathbf{r}_c}^{\mathbf{r}_d} \int \frac{r_{cd} + r_{ac} + r_{bd}}{r_{cd} r_{ac} r_{bd}} \times \\ \times \left[\exp\left(\frac{im}{2\hbar T}\right) (r_{cd} + r_{ac} + r_{bd})^2 \right] V(\mathbf{r}_c) V(\mathbf{r}_d) d^3\mathbf{r}_c d^3\mathbf{r}_d, \quad (6.58)$$

где точки a, b, c и d расположены так, как это показано на фиг. 6.9; величина r_{cd} равна расстоянию между точками c и d и т. д. Полагая, что потенциал $V(\mathbf{r})$ становится пренебрежимо малым на расстояниях, небольших по сравнению с R_a и R_b , покажите, что



Ф и г. 6.9. Учет членов второго порядка в разложении теории возмущений. Как на фиг. 6.2 (случай 3), здесь изображено рассеяние электрона атомным потенциалом в двух различных точках. Электрон выходит из точки a и движется как свободная частица до точки c , где он рассеивается; после этого электрон снова движется как свободная частица до точки d , где происходит еще одно рассеяние, и далее снова продолжается свободное движение вплоть до точки b , где электрон попадает в счетчик. Точки c и d могут находиться в любом месте пространства. Атомный потенциал в этих точках зависит от длин радиусов-векторов $\mathbf{r}_c$ и $\mathbf{r}_d$, измеряемых от центра атома O .

эффективное сечение дается формулой $\sigma = |f|^2$, где f — амплитуда рассеяния, содержащая лишь члены первого приближения:

$$f = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbf{r}} e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_b \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{r} + \\ + \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int_{\mathbf{r}_c}^{\mathbf{r}_d} \int e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_b \cdot \mathbf{r}_d} V(\mathbf{r}_d) \left(\frac{1}{r_{cd}}\right) e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{r}_c} \times \\ \times V(\mathbf{r}_c) e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{r}_c} d^3\mathbf{r}_c d^3\mathbf{r}_d + \text{члены более высокого порядка.} \quad (6.59)$$

Здесь $\mathbf{p}_b$ — импульс электрона, вылетающего в направлении $\mathbf{R}_b$, а $\mathbf{p}_a$ — импульс электрона, движущегося в направлении

— R_a . Абсолютная величина импульса равна p , и она почти не меняется при упругом рассеянии электрона на относительно тяжелом атоме.

Можно было бы ожидать, что, когда борновское приближение становится недостаточно точным, имеет смысл вычислять в качестве поправки члены второго порядка и т. д. Но на практике оказывается, что в выражениях типа (6.59) мы встречаемся с весьма медленно сходящимися рядами. Если второй член дает сравнительно заметную поправку (например, $\sim 10\%$), то каждый следующий член даст ненамного меньший вклад, так что получить существенное улучшение результата довольно нелегко. Конечно, в задачах, где погрешности борновского приближения сравнительно малы (скажем, меньше 1%), учет второго члена является вполне хорошим способом вычисления поправок.

Описание рассеяния с помощью волновой функции. В рассмотренных выше экспериментах по рассеянию мы предполагали, что в начальном состоянии электрон был свободной частицей с импульсом p_a . Предполагалось также, что величину этого импульса можно определить методом измерения времени пролета (т. е. по полному времени T , необходимому для прохождения расстояния $R_a + R_b$).

Конечно, не обязательно использовать именно этот способ; нас вполне удовлетворит любое устройство, которое позволит определять величину импульса. Поэтому обобщим рассмотренную картину процесса рассеяния, воспользовавшись понятием волновой функции.

Допустим, нам известно, что влетающий электрон имеет импульс p_a и энергию $E_a = p_a^2/2m$. Следовательно, волновая функция налетающих электронов

$$\varphi_a = e^{(i/\hbar)p_a \cdot \mathbf{r}} e^{-(i/\hbar)E_a t}. \quad (6.60)$$

Используя теперь два первых члена соотношения (6.25), мы можем в первом приближении теории возмущений записать следующее выражение для волновой функции вылетающих электронов:

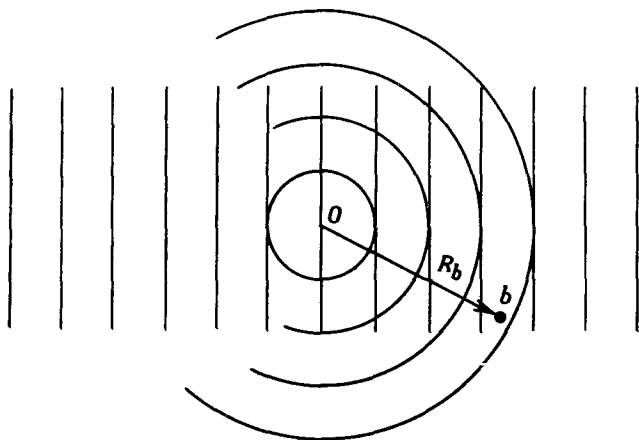
$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{R}_b, t_b) = & e^{(i/\hbar)p_a \cdot \mathbf{R}_b} e^{-(i/\hbar)E_a t_b} - \\ & - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t_b} \int V(\mathbf{r}, t) e^{(i/\hbar)p_a \cdot \mathbf{r}} e^{-(i/\hbar)E_a t} d^3\mathbf{r} dt. \end{aligned} \quad (6.61)$$

Первый член в этом выражении представляет собой дебройлевскую волну свободных частиц, которые проходят область действия потенциала, не рассеявшись. Второй член — амплитуда рассеянных электронов. Если обозначить его через ψ_s , то эта функция опишет рассеянную волну.

Задача 6.13. Предположим, что потенциал $V(r, t)$ в действительности не зависит от времени t . Подставив в формулу (6.61) выражение ядра K_0 , соответствующее движению свободных частиц, и проинтегрировав полученный результат по переменной t , покажите, что

$$\psi(\mathbf{R}_b, t_b) = e^{(i/\hbar)E_b t_b} [e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{R}_b} + \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{r_{bc}}^{\mathbf{r}_c} \frac{1}{r_{bc}} e^{(i/\hbar)p r_{bc}} V(\mathbf{r}_c) e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{r}_c} d^3\mathbf{r}_c, \quad (6.62)$$

где r_{bc} — расстояние от конечной точки b до переменной точки интегрирования c , а p — абсолютная величина импульса электрона.



Фиг. 6.10. Рассеяние электронного пучка на атомном ядре.

Пучок электронов можно представить в виде эквивалентной ему плоской волны, движущейся по направлению к атомному ядру, расположенному в точке $R = O$. Правее этой точки большая часть пучка будет по-прежнему двигаться как невозмущенная плоская волна с импульсом $\mathbf{p}_a$. Меньшая часть пучка рассеивается на ядре и расходится от точки O в виде сферической волны. Поэтому суммарная интенсивность (т.е. число электронов) в некоторой точке b , определяемой радиусом-вектором $\mathbf{R}_b$, состоит из двух частей. Одна из них представляет собой нерассеянный пучок, описываемый плоской волной $\exp(i\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{R}_b/\hbar)$. Вторая — это рассеянная сферическая волна $(1/R_b) \exp(iR_b/\hbar)$ с зависящей от углов амплитудой f . Комбинация этих двух волн определяет пространственную часть волновой функции пучка электронов после рассеяния.

Предположив снова, что на небольших по сравнению с R_a и R_b расстояниях потенциал спадает до нуля, покажите, что выражение (6.62) может быть записано как

$$\psi(\mathbf{R}_b, t_b) = e^{(i/\hbar)E_b t_b} e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{R}_b} + f \frac{e^{(i/\hbar)p R_b}}{R_b}, \quad (6.63)$$

где амплитуда рассеяния f следующим образом выражается через функцию $v(q)$:

$$f = \frac{m}{2\pi\hbar^2} v(q) \quad (6.64)$$

[см. соотношение (6.35)].

Последний член формулы (6.63), функцию $(f/R_b) \exp(ipR_b/\hbar)$, можно рассматривать как пространственную часть волновой функции рассеянных частиц. Она имеет вид сферической волны, расходящейся из центра рассеивающего атома. Для каждого определенного угла рассеяния амплитуда этой волны зависит от угла через функцию f , которая, как видно из формулы (6.64), изменяется в зависимости от величины передаваемого импульса q . Таким образом, полная волновая функция электронов после рассеяния может рассматриваться как сумма двух членов. Первый член представляет собой плоскую волну нерассеянных электронов $\exp(ip_a \cdot R_b/\hbar)$, второй член — сферическую волну рассеянных электронов, как показано на фиг. 6.10. Используя такой подход, выведите формулу для эффективного сечения σ .

Задача 6.14. С помощью метода, основанного на использовании волновых функций, рассмотрите рассеяние электрона на синусоидально осциллирующем поле, потенциал которого имеет вид

$$V(rt) = U(r) \cos \omega t. \quad (6.65)$$

Покажите, что в первом борновском приближении энергия расходящейся волны изменяется на величину, равную $\pm \omega$. Что дадут члены высших порядков?

§ 5. Возмущения, зависящие от времени, и амплитуды переходов

Амплитуда перехода. Теория возмущений оказывается особенно полезной, когда потенциал U , соответствующий невозмущенной задаче, не зависит от времени. Из соотношения (4.59) видно, что ядро в этом случае может быть разложено в ряд по собственным функциям φ_n и собственным значениям невозмущенной задачи

$$K_U(2, 1) = \sum_n \varphi_n(x_2) \varphi_n^*(x_1) e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)} \text{ для } t_2 > t_1 \quad (6.66)$$

(для простоты ограничимся случаем одномерного движения).

Рассмотрим теперь полученные ранее разложения ядра $K_U(2, 1)$, подставив в них выражение для K_U . Если выписать только два

первых члена, то

$$K_V(2, 1) = \sum_n \varphi_n(x_2) \varphi_n^*(x_1) e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)} - \\ - \frac{i}{\hbar} \sum_n \sum_m \int \varphi_m(x_2) \varphi_m^*(x_3) V(x_3, t_3) e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_3)} \varphi_n(x_3) \times \\ \times \varphi_n^*(x_1) e^{-(iE_n/\hbar)(t_3-t_1)} dx_3 dt_3 + \dots \quad (6.67)$$

Ясно, что в каждом члене разложения переменная x_1 входит лишь через волновую функцию $\varphi_m^*(x_1)$; аналогичным образом входит и переменная x_2 , поэтому ядро K_V мы всегда можем записать в виде

$$K_V(2, 1) = \sum_n \sum_m \lambda_{mn}(t_2, t_1) \varphi_m(x_2) \varphi_n^*(x_1), \quad (6.68)$$

где λ — коэффициенты, зависящие от t_2 и t_1 . Будем называть эти коэффициенты *амплитудами перехода*. В нулевом порядке по V ядро (6.68) должно совпадать с ядром K_U , так что в этом порядке $\lambda_{mn} = \delta_{mn} \exp[-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)]$. Если коэффициенты λ разложить в ряд по возрастающим степеням потенциала V , то получим

$$\lambda_{mn} = \delta_{mn} e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)} + \lambda_{mn}^{(1)} + \lambda_{mn}^{(2)} + \dots \quad (6.69)$$

Сравнивая это выражение с формулой (6.67), получаем далее

$$\lambda_{mn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{t_1}^{t_2} \varphi_m^*(x_3) V(x_3, t_3) \varphi_n(x_3) \times \\ \times dx_3 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[E_m(t_3-t_2) - E_n(t_3-t_1)]\right\} dt_3. \quad (6.70)$$

Задача 6.15. В задаче 5.4 мы определили некий интеграл как амплитуду перехода из состояния $\psi(x)$ в состояние $\chi(x)$. Покажите, что функция λ_{mn} удовлетворяет этому определению, если начальное состояние описывается собственной функцией $\varphi_n(x)$, а конечное состояние — собственной функцией $\varphi_m(x)$.

Обозначим для краткости

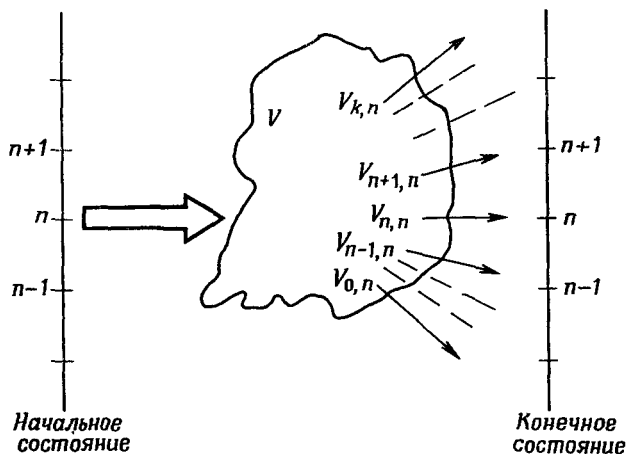
$$V_{mn}(t_3) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^*(x_3) V(x_3, t_3) \varphi_n(x_3) dx_3 \quad (6.71)$$

(эта величина иногда называется матричным элементом потенциала V , взятым между состояниями n и m). Тогда формулу (6.70) можно записать в виде

$$\lambda_{mn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} e^{-(i/\hbar)E_m t_2} e^{(i/\hbar)E_n t_1} \int_{t_1}^{t_2} V_{mn}(t_3) e^{(i/\hbar)(E_m - E_n)t_3} dt_3. \quad (6.72)$$

Мы получили важный результат нестационарной теории возмущений. Коэффициент λ_{mn} представляет собой амплитуду вероятности того, что в момент времени t_2 система будет обнаружена в состоянии m , если первоначально она находилась в состоянии n .

Предположим, что волновая функция в момент времени t_1 была равна $\varphi_n(x_1)$. Спрашивается, какой она станет в момент



Ф и г. 6.11. На систему, находящуюся вначале на n -м энергетическом уровне, действует потенциал V , который «рассеивает» систему во все возможные для нее состояния.

При этом амплитуда рассеяния в k -е состояние будет пропорциональна V_{kn} . В частности, амплитуда рассеяния из состояния n в состояние m за время dt равна $-(i/\hbar) V_{mn}(t) dt$.

времени t_2 ? Используя соотношение (3.42), можно представить эту функцию в момент времени t_2 как

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} K_V(2, 1) \varphi_n(x_1) dx_1 = \\ & = \sum_k \sum_l \lambda_{kl} \varphi_k(x_2) \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_l^*(x_1) \varphi_n(x_1) dx_1 = \sum_k \lambda_{kn} \varphi_k(x_2). \end{aligned} \quad (6.73)$$

Это означает, что волновая функция в момент времени t_2 имеет вид $\sum_m C_m \varphi_m(x_2)$.

Такое разложение по собственным функциям впервые применялось в формуле (4.48). Теперь можно придать более глубокий смысл постоянным C_m , а именно интерпретировать их как амплитуды вероятности обнаружения системы в состояниях φ_m . В этом

частном случае C_m равно λ_{mn} и представляет собой амплитуду вероятности того, что в момент времени t_2 система будет находиться в состоянии φ_m , если в момент времени t_1 она была в состоянии φ_n .

Если система находится в состоянии n и на нее не действует потенциал, то она будет всегда находиться в этом состоянии с амплитудой, которая изменяется со временем. Таким образом, в нулевом порядке $\lambda_{mn} = \delta_{mn} \exp \left[- (iEn/\hbar) (t_2 - t_1) \right]$. Член первого порядка мы можем интерпретировать в соответствии со следующим правилом (фиг. 6.11): *амплитуда вероятности рассеяния из состояния n в состояние m за промежуток времени dt равна $-(i/\hbar) V_{mn} dt$.*

Задача 6.16. Интерпретируйте соотношение (6.71), рассмотрев его как сумму по всем альтернативам, т. е. укажите эти альтернативы.

Задача 6.17. Интерпретируйте формулу (6.72), объяснив значение каждого члена. После этого выведите и объясните смысл соответствующей формулы для коэффициента λ во втором порядке теории возмущений:

$$\lambda_{mn}^{(2)} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \int_{t_1}^{t_4} \sum_k \exp \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) E_m (t_2 - t_4) \right] V_{mk}(t_4) \times \right. \\ \left. \times \exp \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) E_k (t_4 - t_3) \right] V_{kn}(t_3) \exp \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) E_n (t_3 - t_1) \right] dt_3 \right\} dt_4. \quad (6.74)$$

Задача 6.18. Получите и объясните интегральное уравнение

$$\lambda_{mn}(t_2, t_1) = \delta_{mn} \exp \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) E_m (t_2 - t_1) \right] - \\ - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \exp \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) E_m (t_2 - t_3) \right] \sum_k V_{mk}(t_3) \lambda_{kn}(t_3, t_1) dt_3. \quad (6.75)$$

Задача 6.19. Будем считать, что коэффициент $\lambda_{mn}(t_2)$ является функцией конечного момента времени t_2 . Покажите, используя уравнение (6.75) или ряд (6.69), что

$$\frac{d}{dt_2} \lambda_{mn}(t_2) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_m - E_k) t_2 \right] \times \\ \times V_{mk}(t_2) \lambda_{kn}(t_2) - \frac{1}{\hbar} E_m \lambda_{mn}(t_2). \quad (6.76)$$

Дайте физическую интерпретацию этого результата. Затем получите этот результат непосредственно из уравнения Шредингера.

З а м е ч а н и е. Для этого следует воспользоваться формулой (6.73), подставив ее в уравнение Шредингера.

Отметим, что уравнение (6.76) вместе с начальным условием $\lambda_{mn}(t_1) = \delta_{mn}$ может быть использовано для непосредственного определения коэффициента λ .

Мы можем рассматривать все члены ряда (6.69) в соответствии с правилом, которое гласит: выражение $-(i/\hbar) V_{mn}(t) dt$ является амплитудой рассеяния (или индуцированного перехода) из состояния n в состояние m в течение промежутка времени dt , вызванного потенциалом V . Переход из состояния n в состояние m может произойти посредством 0, 1, 2, ... и большего числа рассеяний. Прямой переход из одного состояния в другое без рассеяния может происходить только в случае, когда $m = n$; именно поэтому первый член в разложении (6.69) пропорционален δ_{mn} .

Второй член, определяемый формулой (6.72), представляет собой амплитуду вероятности перехода, обусловленного единичным рассеянием. Амплитуда вероятности обнаружения частицы в момент времени t_3 в начальном состоянии n равна $\exp[-iE_n(t_3 - t_1)/\hbar]$. (В этом случае выражение «вероятность обнаружить частицу в состоянии n » следует понимать как «возможность рассеяния частицы из состояния n под действием потенциала V ».) Амплитуда рассеяния частицы потенциалом V из состояния n в состояние m равна $-(i/\hbar) V_{mn}$. Наконец, амплитуда вероятности обнаружить частицу в момент времени t_3 в состоянии m (что в данном случае эквивалентно амплитуде вероятности перехода частицы в состояние m за время, в течение которого происходил процесс рассеяния) пропорциональна $\exp[-iE_m(t_2 - t_3)/\hbar]$. Это рассеяние может иметь место в любой момент времени в интервале между t_1 и t_2 , поэтому выполняется интегрирование по времени t_3 между этими двумя конечными точками.

Третий член формулы (6.74) является амплитудой перехода, происходящего вследствие двух актов рассеяния. Первое рассеяние переводит систему из начального состояния n в промежуточное состояние k в момент времени t_3 . Далее, система остается в этом состоянии вплоть до момента времени t_4 т. е. до тех пор, пока ее способность к рассеянию не будет снова определяться экспоненциальной функцией $\exp[(-i/\hbar) E_k(t_4 - t_3)]$. Следующее рассеяние происходит в момент времени t_4 и переводит систему из состояния k в состояние n . Мы интегрируем по всем возможным альтернативным временам рассеяния t_4 и t_3 , требуя лишь, чтобы момент времени t_3 предшествовал моменту t_4 . Далее мы суммируем по всем возможным промежуточным состояниям k , в которые может перейти наша система.

Члены ряда (6.69), для которых мы только что дали интерпретацию, представляют собой основной результат нестационарной теории возмущений. Этот результат применим в случае, когда невозмущенная система имеет *постоянный гамильтониан* и, следовательно, *определенные значения энергии*. Перейдем теперь к более подробному изучению некоторых частных случаев этой теории.

Переходы первого порядка. Рассмотрим прежде всего случай, когда конечное состояние системы m отличается от ее начального состояния n , и ограничимся только первым борновским приближением, т. е. вторым членом ряда (6.69). Такой подход оправдан для малых значений потенциала V . Амплитуда перехода из состояния m в состояние n

$$\lambda_{mn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} e^{(i/\hbar)(E_n - E_m)t} V_{mn}(t) dt e^{-(i/\hbar)(E_n t_2 - E_m t_1)}. \quad (6.77)$$

Это очень важный частный случай нестационарной теории возмущений. В качестве первого примера предположим, что $V(x, t) = V(x)$, т. е. что потенциал не содержит явной зависимости от времени. Если мы рассмотрим теперь интервал от $t = 0$ до $t = T$, то (поскольку матричный элемент V_{mn} не зависит от времени) получим

$$\begin{aligned} \lambda_{mn}^{(1)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_n t_2 - E_m t_1) \right] &= \\ &= -\frac{i}{\hbar} V_{mn} \int_0^T \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t \right] dt = V_{mn} \frac{\exp [(i/\hbar)(E_n - E_m) T] - 1}{E_m - E_n}. \end{aligned} \quad (6.78)$$

Следовательно, вероятность перехода за интервал времени, равный T ,

$$P(n \rightarrow m) = |\lambda_{mn}^{(1)}|^2 = |V_{mn}|^2 \left[4 \sin^2 \frac{(E_n - E_m) T}{2\hbar} \right] (E_n - E_m)^{-2}. \quad (6.79)$$

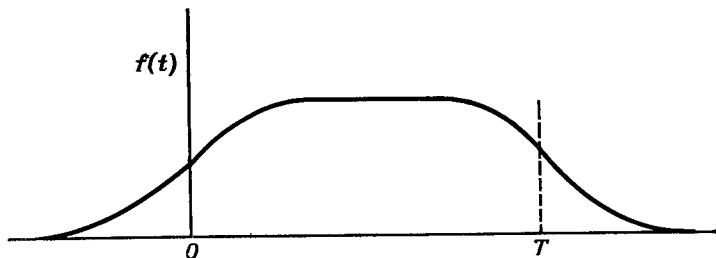
Мы видим, что по крайней мере для большого интервала T эта вероятность является быстро осциллирующей функцией от разности энергий $E_n - E_m$. Если значения энергии E_n и E_m достаточно сильно отличаются друг от друга, т. е. если $|V_{mn}| \ll |E_m - E_n|$, то вероятность $P(n \rightarrow m)$ будет очень мала. Это означает, что чрезвычайно мала вероятность найти значительное различие в энергиях начального и конечного состояний системы, подверженной действию очень слабого стационарного возмущения. Можно спросить, каким образом вообще малое возмущение V_{mn} может привести к значительному изменению энергии $E_m - E_n$? Ответ таков: мы рассматриваем возмущение V , внезапно

возникающее в некоторый момент времени $t = 0$, поэтому точное указание этого момента уже само по себе в силу принципа неопределенности допускает большую неопределенность значения энергии [см. формулу (5.19) и связанное с ней обсуждение].

Задача 6.20. Предположим, что потенциал V сначала плавно возрастает, а затем плавно уменьшается. Пусть, например, $V(x, t) = V(x)f(t)$ — гладкая функция, определяемая условиями

$$f(t) = \begin{cases} \frac{1}{2e^{\gamma t}}, & \text{если } t = 0, \\ 1 - \frac{1}{2e^{\gamma t}}, & \text{если } 0 < t < \frac{T}{2}, \\ 1 - \frac{1}{2e^{-\gamma(T-t)}}, & \text{если } \frac{T}{2} < t < T, \\ \frac{1}{2e^{-\gamma(t-T)}}, & \text{если } t > T \end{cases} \quad (6.80)$$

(фиг. 6.12). Допустим далее, что фактор $1/\gamma$, определяющий временной рост функции $f(t)$, намного меньше величины T ($1/\gamma \ll T$).



Фиг. 6.12. Зависимость от времени потенциала, обуславливающего переход из состояния m в состояние n .

Как только зависимость от времени $f(t)$ становится более слабой, т. е. разрывы остаются лишь в производных существенно более высоких порядков, вероятность перехода уменьшается.

Кроме того, предположим, что $\gamma \ll (E_m - E_n)$. Покажите что величина вероятности (6.79) уменьшается в этом случае в ξ раз, где $\xi = \{ \gamma^2 / [\gamma^2 + (E_m - E_n)^2] \}^2$. При определении функции $f(t)$ в виде (6.80) мы имеем еще разрывы второй производной по времени; более гладкие функции приводят к еще большему уменьшению величины $P(n \rightarrow m)$.

Может случиться, что значения энергии E_m и E_n будут в точности равны друг другу; в этом случае вероятность перехода $P(n \rightarrow m) = |V_{mn}|^2 T^2 / \hbar^2$ и возрастает пропорционально квадрату времени. Это означает, что понятие вероятности перехода

на единицу времени в данном случае не имеет смысла. Указанная выше формула применима только для достаточно малых значений T , таких, что $V_{mn}T \ll \hbar$. Если у нас имеются только два состояния с одинаковой энергией, то оказывается, что вероятность обнаружить систему в первом из этих состояний равна $\cos^2(|V_{mn}|T/\hbar)$, а вероятность ее обнаружения во втором состоянии равна $\sin^2(|V_{mn}|T/\hbar)$, так что наша формула является всего лишь первым приближением к этим выражениям.

Задача 6.21. Рассмотрим такой частный случай, когда возмущающий потенциал V не имеет никаких матричных элементов, кроме тех, что описывают переходы между уровнями 1 и 2; будем считать, что эти уровни вырождены, т. е. энергия $E_1 = E_2$. Пусть $V_{12} = V_{21} = v$, а V_{11} , V_{22} и все другие матричные элементы V_{mn} равны нулю. Покажите, что

$$\lambda_{11} = 1 - \frac{v^2 T^2}{2\hbar^2} + \frac{v^4 T^4}{24\hbar^4} - \dots = \cos \frac{vT}{\hbar}, \quad (6.81)$$

$$\lambda_{12} = -i \frac{vT}{\hbar} + i \frac{v^3 T^3}{6\hbar^3} - \dots = -i \sin \frac{vT}{\hbar}. \quad (6.82)$$

Задача 6.22. В задаче 6.21 мы имели равенство $V_{12} = V_{21}$, поэтому матричный элемент V_{12} является действительной величиной. Покажите, что и в том случае, когда V_{12} — комплексная величина, физические результаты остаются теми же самыми (при этом следует положить $v = |V_{12}|$).

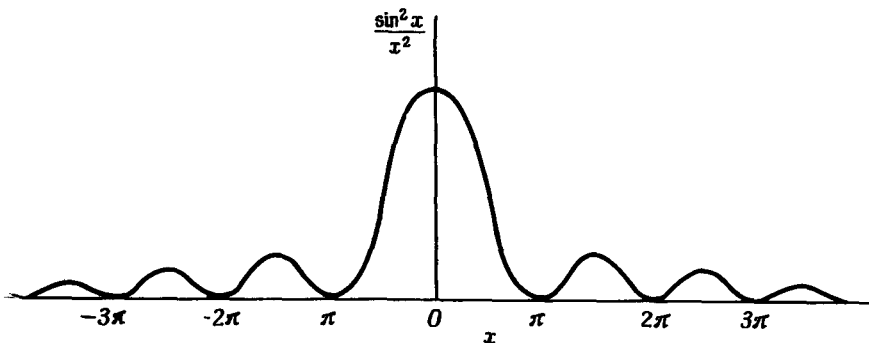
Такие системы колеблются, переходя из одного состояния в другое, и обратно. Отсюда можно вывести некоторые дополнительные следствия. Предположим, что возмущение действует чрезвычайно длительное время, так что $V_{mn}T/\hbar \gg 1$. Тогда, рассматривая систему в произвольный момент времени T (который до некоторой степени является неопределенным), найдем, что вероятности обнаружить систему в первом или во втором состояниях в среднем равны друг другу. Другими словами, если на систему с двумя состояниями, энергии которых в точности равны друг другу, очень долгое время действует какое-то слабое возмущение, то оба эти состояния становятся равновероятными. Этот вывод окажется нам полезен, когда в гл. 10 мы будем рассматривать вопросы статистической механики.

Особенно важен случай, когда допустимые значения энергии конечного состояния E_m не являются дискретными, а лежат непрерывно или по крайней мере расположены чрезвычайно близко друг к другу. Пусть $\rho(E) dE$ — число уровней или состояний в интервале энергий от E до $E + dE$. Тогда можно поставить вопрос об определении вероятности перехода в некоторое состояние

этого непрерывного спектра. Прежде всего мы видим, что весьма маловероятен переход в любое состояние, для которого разность энергий $E_n - E_m$ велика; более вероятно, что конечное состояние будет одним из тех, которые расположены вблизи начальной энергии E_n (в пределах $\pm V_{mn}$). Полная вероятность перехода в некоторое состояние

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} P(n \rightarrow m) &= \sum_{m=1}^{\infty} |V_{mn}|^2 \frac{4 \sin^2[(E_m - E_n) T / 2\hbar]}{(E_m - E_n)^2} \approx \\ &\approx \int_{E_m}^{E_n} |V_{mn}|^2 \frac{4 \sin^2[(E_m - E_n) T / 2\hbar]}{(E_m - E_n)^2} \rho(E_m) dE_n. \end{aligned} \quad (6.83)$$

Величина $\{4 \sin^2[(E_m - E_n) T / 2\hbar]\} / (E_m - E_n)^2$ очень велика, если $E_m \approx E_n$, и имеет наибольшее значение, равное $T^2/\hbar^2$. Эта



Фиг. 6.13. Поведение подынтегральной функции.

Разность энергий $E_m - E_n$ выражена переменной x . Когда обе эти энергии становятся приблизительно равными (другими словами, когда x очень мало), функция $\sin^2 x/x^2$ достигает своей максимальной величины. Для больших значений разности энергий эта функция становится очень малой. Поэтому во всех выражениях, в которые входит эта функция, основная часть вклада приносится центральной областью, т. е. областью, где энергии E_m и E_n приблизительно равны друг другу.

величина значительно уменьшается, когда энергии E_m и E_n существенно различны (т. е. $E_m - E_n \gg \hbar/T$), как это показано на фиг. 6.13. Таким образом, интеграл по переменной E_m почти целиком определяется значениями E_m , лежащими в окрестности точки E_n .

Если матричный элемент V_{mn} изменяется не очень быстро, так что мы можем заменить его некоторым средним значением, и если, кроме того, плотность уровней $\rho(E_m)$ также изменяется медленно, то интеграл (6.83) можно достаточно точно представить

выражением

$$4 |V_{mn}|^2 \rho(E_n) \int \frac{\sin^2[(E_m - E_n)T/2\hbar]}{(E_m - E_n)^2} dE_m. \quad (6.84)$$

Так как $\int_{-\infty}^{\infty} [(\sin^2 x)/x^2] dx = \pi$, то интеграл (6.84) равен $\pi T/2\hbar$

и в результате получаем, что вероятность перехода в некоторое состояние непрерывного спектра выразится в виде

$$P(n \rightarrow m) = 2\pi |V_{mn}|^2 \frac{\rho(E_n) T}{\hbar}; \quad (6.85)$$

при этом энергия в конечном состоянии останется той же, что и в начальном. Отсюда вероятность перехода в единицу времени мы можем записать как

$$\frac{dP(n \rightarrow m)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{n \rightarrow m}|^2 \rho(E), \quad (6.86)$$

где величина $M_{n \rightarrow m}$ называется *матричным элементом перехода*, а $\rho(E)$ — плотность уровней в конечном состоянии. В нашем случае матричный элемент $M_{n \rightarrow m}$ совпадает с V_{mn} ; если же перейти к более высоким порядкам разложения по λ_{mn} , то вид этого элемента становится гораздо сложнее.

Выражение (6.86) можно записать иначе, а именно как вероятность перехода за единицу времени из состояния n в некоторое заданное состояние m :

$$\frac{dP(n \rightarrow m)}{dt} = \frac{2\pi \delta(E_n - E_m) |M_{n \rightarrow m}|^2}{\hbar}. \quad (6.87)$$

Тогда, после того как мы просуммируем по всем состояниям m , останутся лишь те, для которых $E_n = E_m$. Сделав замену $\sum_m \rightarrow \int dE_m \rho(E_m)$, получим в результате формулу (6.86).

Выражение (6.86) мы можем проиллюстрировать на примере (который ранее был рассмотрен с несколько другой точки зрения) рассеяния электрона в потенциальном поле (см. § 4). Предположим, что на свободную частицу действует центральная сила с потенциалом $V(r)$ и мы хотим изучить рассеяние этой частицы при переходе из некоторого начального состояния с определенным значением импульса в конечное состояние с другим значением импульса, имеющим новое направление. Будем считать, что начальное состояние n описывается плоской волной с импульсом p_1 , так что волновая функция φ_n имеет вид $\exp(i p_1 \cdot r / \hbar)$ (функция нормирована таким образом, чтобы интеграл от квадрата модуля $|\varphi_n|^2$ по единичному объему был равен единице). Допустим, что конечное состояние также описывается плоской волной с им-

пульсом $\mathbf{p}_2$ и, следовательно, его волновая функция φ_m есть $\exp(i\mathbf{p}^2 \cdot \mathbf{r}/\hbar)$. Тогда для матричного элемента V_{mn} будем иметь

$$V_{mn} = \int \mathbf{r} e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{r} = v(\mathbf{q}), \quad (6.88)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1$. В процессе такого рассеяния энергия будет сохраняться, поэтому $\mathbf{p}_2^2/2m = \mathbf{p}_1^2/2m$. Это означает, что абсолютные значения импульсов $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ равны. Положим их равными p , т. е.

$$|\mathbf{p}_2| = |\mathbf{p}_1| = p.$$

В соответствии с принятым нами соглашением относительно записи элемента объема в импульсном пространстве число состояний, имеющих импульсы в элементе объема $d^3\mathbf{p}_2$, равно $d^3\mathbf{p}_2/(2\pi\hbar)^3 = p^2 dp d\Omega/(2\pi\hbar)^3$, где $d\Omega$ — элемент телесного угла, содержащий вектор импульса $\mathbf{p}_2$. Дифференциал энергии dE и элементарный объем в пространстве импульсов связаны соотношением

$$dE = d \frac{p^2}{2m} = \frac{p dp}{m}. \quad (6.89)$$

Таким образом, плотность импульсных состояний частиц, вылетающих в телесный угол $d\Omega$,

$$d\rho(E) = \frac{1}{dE} \frac{d^3\mathbf{p}_2}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{mp d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = \rho(E) d\Omega. \quad (6.90)$$

Подставив эти соотношения в формулу (6.86), определим вероятность перехода за 1 сек в элемент телесного угла $d\Omega$:

$$\frac{dP}{dt} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar^2} \right)^2 mp d\Omega |v(\mathbf{q})|^2. \quad (6.91)$$

Обозначим эффективную площадь мишени (эффективное сечение рассеяния в телесный угол $d\Omega$) как $d\sigma$ (ср. § 4 и 6). Так как в качестве исходных мы взяли волновые функции φ_n , нормированные на единичный объем (другими словами, относительная вероятность обнаружить частицу в каком-либо единичном объеме равна у нас единице), то число частиц, попадающих на площадь $d\sigma$ в единичное время, равно произведению эффективного сечения на скорость налетающих частиц $u_1 = p_1/m$. Поэтому

$$\frac{dP}{dt} d\Omega = u_1 d\sigma = \frac{p_1}{m} d\sigma. \quad (6.92)$$

Для эффективного сечения отсюда следует выражение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |v(\mathbf{q})|^2, \quad (6.93)$$

которое в точности совпадает с ранее полученным выражением (6.44).

Задача 6.23. Покажите, что для сечения $d\sigma/d\Omega$ получится тот же самый результат и в том случае, если волновая функция φ_n нормирована на единицу в некотором произвольном объеме V .

Задача 6.24. Пусть потенциал V — периодическая функция времени. Например, положим $V(x, t) = V(x) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$. Покажите, что вероятность перехода мала, если только конечное состояние не совпадает с одним из следующих двух состояний: 1) состояние, энергия которого $E_{\text{кон}} = E_{\text{нач}} + \hbar\omega$ (это будет соответствовать поглощению энергии), или 2) состояние, где $E_{\text{кон}} = E_{\text{нач}} - \hbar\omega$ (что соответствует излучению энергии). Это означает, что вид формулы (6.86) не изменяется, однако плотность состояний $\rho(E)$ должна вычисляться для этих новых значений E . Аналогично соотношению (6.87) мы имеем

$$\frac{dP(n \rightarrow m)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{n \rightarrow m}|^2 [\delta(E_m - E_n - \hbar\omega) + \delta(E_m - E_n + \hbar\omega)]. \quad (6.94)$$

Задача 6.25. Явление фотоэффекта показывает, что не только уравнениям механики, но и всем электродинамическим соотношениям следует придать квантовую форму. Это явление заключается в том, что свет частоты ω , попадая на тонкий слой металла, с определенной вероятностью вызывает испускание электрона с энергией $\hbar\omega$. Возможен ли такой эффект, если вещество подчиняется квантовым законам, а свет по-прежнему будет рассматриваться как непрерывная волна? Какие соображения (используя результаты задачи 6.24) вы можете привести в пользу того, что нам необходимо отказаться от аппарата классической электродинамики?

Задача 6.26. Предположим, что мы имеем два дискретных энергетических уровня E_1 и E_2 и ни один из них не принадлежит непрерывному спектру. Пусть переход вызывается потенциалом вида $V(x, t) = V(x) f(t)$. Покажите, что вероятность перехода составит

$$P(1 \rightarrow 2) = |V_{12}|^2 |\varphi(\omega_0)|^2, \quad (6.95)$$

если функцию $f(t)$ можно представить в виде интеграла Фурье

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega) e^{i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (6.96)$$

и положить $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$. В случае, когда $f(t)$ — известная из теории шумов статистически нерегулярная функция (так называемый фильтрованный белый шум), величина $\varphi(\omega)$, опре-

деляемая обратным преобразованием

$$\varphi(\omega) = \int_{-T}^T f(t) e^{-i\omega t} dt, \quad (6.97)$$

оказывается зависящей от размеров T области изменения переменной интегрирования t , T . Если T очень велико, то можно показать, что квадрат абсолютной величины $|\varphi(\omega_0)|^2$ пропорционален T . В итоге мы получим вероятность перехода, пропорциональную произведению времени и «интенсивности» f на единицу интервала частоты, взятую при значении ω_0 («интенсивность», или «мощность», равна среднеквадратичному значению функции f за время 1 сек). Таким образом, вероятность перехода атома в область непрерывного спектра пропорциональна, во-первых, времени экспозиции и, во-вторых, интенсивности поглощения света с частотой $(E_2 - E_1)/\hbar$.

Высшие члены разложения. Интересно рассмотреть второй член ряда теории возмущений. Он особенно важен в тех задачах, где для интересующих нас состояний m и n потенциал $V_{mn} = 0$. Допустим, что в такой задаче имеются другие состояния $k \neq m$ для которых $V_{km} \neq 0$. Член первого порядка равен нулю, а поскольку $n \neq m$, то член нулевого порядка также обращается в нуль. Поэтому первый член, который следует учитывать при вычислении амплитуды перехода, является членом второго порядка.

Предположим, что потенциал V не зависит от времени t . Тогда член второго порядка в матричном элементе перехода будет равен λ_{mn}^2 , и если $T = t_2 - t_1$, то из соотношения (6.74) будет следовать, что

$$\begin{aligned} e^{+(i/\hbar)(Emt_2 - En t_1)} \lambda_{mn}^{(2)} &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_k V_{mk} V_{kn} \int_0^T dt_4 \int_0^{t_4} dt_3 \times \\ &\times e^{(i/\hbar)(Em - Ek)t_4} e^{(i/\hbar)(Ek - En)t_3} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_k V_{mk} V_{kn} \int_0^T e^{(i/\hbar)(Em - Ek)t_4} (e^{(i/\hbar)(Ek - En)t_4} - 1) \frac{dt_4}{E_k - E_n} = \\ &= \sum_k \frac{V_{mk} V_{kn}}{E_k - E_n} \left(\frac{e^{(i/\hbar)(Em - En)T} - 1}{E_m - E_n} - \frac{e^{(i/\hbar)(Em - Ek)T} - 1}{E_m - E_k} \right). \quad (6.98) \end{aligned}$$

Первый из двух членов в последнем сомножителе этого выражения зависит от времени точно так же, как и член первого порядка, с которым мы уже встречались ранее. Следовательно, если мы отбросим второй член, то получим результат, который снова

с вероятностью, пропорциональной T , описывает переход в состояния с энергией $E_m = E_n$. Вероятность на единицу времени здесь опять-таки определяется выражением (6.86), но только матричный элемент $M_{n \rightarrow m}$ принимает вид

$$M_{n \rightarrow m} = \sum_k \frac{V_{mk} V_{kn}}{E_k - E_n}. \quad (6.99)$$

Если предположить, что состояния системы лежат в непрерывном спектре, то сумма (6.99) превратится в интеграл.

Соотношение (6.99) верно лишь при условии, что переходы первого порядка невозможны не только в состояние m , но и в любое состояние k , имеющее ту же самую энергию, что и начальное состояние. В этом случае $V_{kn} = 0$ для всех состояний, у которых $E_k = E_n$. Таким образом, второй член в формуле (6.98) никогда не будет большим, так как он может стать таковым лишь в том случае, когда разность $E_n - E_k$ почти равна нулю, но при этом и величина V_{kn} в числителе также будет близкой к нулю. Так как все эффекты обусловлены первым членом, то формула (6.99) является математически корректной. Более того, сумма по k в выражении (6.98) может иметь предел и в полюсе (точке $E_k = E_m$), поскольку числитель этого выражения обращается в нуль при том же значении E_k , что и знаменатель.

С другой стороны, может быть такая ситуация, когда станет возможен переход первого порядка в некоторое другое непрерывное состояние (например, распад ядра может происходить различными путями). В этом случае сумма в формуле (6.99) теряет смысл, так как мы должны определить, что нам делать в окрестности полюса. Для этого в формуле (6.98) надо учесть ранее отброшенный нами второй член разложения, который в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ и дает нам математически правильное выражение:

$$M_{n \rightarrow m} = V_{mn} + \sum_k \frac{V_{mk} V_{kn}}{E_k - E_n - i\varepsilon} \quad (6.100)$$

(для общности здесь выписан также и член первого порядка). Проанализируем теперь, как это происходит.

Прежде всего следует заметить, что при больших значениях T мы можем получить большую величину вероятности перехода (т. е. вероятность, пропорциональную T) лишь в том случае, когда энергии E_n и E_m практически равны друг другу (с точностью до величин порядка $\hbar/T$). Это очевидно для первого члена в формуле (6.98). Что касается второго члена, то большие амплитуды могут появиться здесь лишь тогда, когда $E_k \approx E_m$; если же энергия E_m не слишком близка к E_n , то коэффициент, стоящий перед всем выражением, является гладкой функцией E_k для всех

значений E_k , близких к E_m . Приближенно заменив эту функцию константой в малой области вблизи $E_k = E_m$, мы видим, что второй член может быть аппроксимирован некоторой постоянной величиной, помноженной на фактор

$$\frac{e^{(i/\hbar)\varepsilon T} - 1}{\varepsilon} d\varepsilon,$$

где $\varepsilon = (E_m - E_k)$. Это выражение интегрируется по малой области, скажем от $-\delta$ до $+\delta$. Имеем

$$\int_{-\delta}^{\delta} \frac{e^{(i/\hbar)\varepsilon T} - 1}{\varepsilon} d\varepsilon = \int_{-\delta T/\hbar}^{\delta T/\hbar} \frac{e^{iy} - 1}{y} dy = \int_{-\delta T/\hbar}^{\delta T/\hbar} \left(\frac{\cos y - 1}{y} + \frac{i \sin y}{y} \right) dy. \quad (6.101)$$

Первый интеграл в этом выражении берется от нечетной функции и обращается в нуль. Второй интеграл стремится к конечному пределу, когда $T \rightarrow \infty$ (так как $\delta T/\hbar \rightarrow \infty$):

$$2i \int_0^{\infty} \frac{\sin y}{y} dy = 2\pi i,$$

так что вероятность перехода невелика. Эта вероятность может стать значительной только в том случае, когда энергии E_n и E_m практически равны друг другу, так как совпадение двух полюсов $(E_k - E_n)^{-1}$ и $(E_m - E_k)^{-1}$ приводит к возрастанию роли второго члена. Поэтому мы продолжим анализ, предположив, что E_m и E_n приблизительно равны.

Выбрав некоторое малое значение энергии Δ , разделим сумму по k в выражении (6.98) на две части: часть A , для которой $|E_k - E_n| \geq \Delta$, и часть B , для которой $|E_k - E_n| < \Delta$. Величину Δ мы выберем настолько малой, чтобы коэффициент $V_{mk}V_{kn}$ был приблизительно постоянен, когда энергия E_k будет принимать значения в интервале 2Δ вблизи точки E_n . Выбранная таким образом величина разности энергий Δ является конечной величиной, и T можно взять настолько большим, чтобы выполнялось $\hbar/T \ll \Delta$, а это означает, что $|E_n - E_m| \ll \Delta$.

Итак, для части A выполняется неравенство $|E_k - E_n| \geq \Delta$. Тогда второй член невелик, так как он не имеет полюсов. Вклад вносит только первый член, и он равен

$$a \frac{e^{ix} - 1}{x} \frac{T}{\hbar}, \quad (6.102)$$

где $x = (E_m - E_n) T/\hbar$ и

$$a = \sum_k^{(A)} \frac{V_{mk}V_{kn}}{E_k - E_n}.$$

Суммирование здесь выполняется по всем значениям E_k , за исключением тех, которые попадают в интервал $\pm \Delta$ вблизи E_m . Эта сумма почти не зависит от Δ , и когда $\Delta \rightarrow 0$, она определяет главное значение интеграла. Поэтому в пределе при $\Delta \rightarrow 0$ мы можем написать

$$a = V_{mn} + \sum_k V_{mk} V_{kn} \text{PP} \frac{1}{E_k - E_n}, \quad (6.103)$$

где выписан член первого порядка и символом PP отмечено, что он берется в смысле главного значения.

В части B мы будем считать фактор $V_{mk} V_{kn}$ постоянным и равным его значению в точке $E_k = E_m$. Другими словами, мы заменим

$\sum_k^{(B)} V_{mk} V_{kn} F(E_k)$ выражением

$$\left[\sum_k V_{mk} V_{kn} \delta(E_k - E_m) \right] \int_{E_m - \Delta}^{E_m + \Delta} F(E_k) dE_k, \quad (6.104)$$

которое запишем как в I , где

$$b = \sum_k V_{mk} V_{kn} \delta(E_k - E_m) \quad (6.105)$$

и

$$I = \int_{E_m - \Delta}^{E_m + \Delta} \frac{dE_k}{E_k - E_n} \left(\frac{e^{(i/\hbar)(E_m - E_n)T} - 1}{E_m - E_n} - \frac{e^{(i/\hbar)(E_m - E_k)T} - 1}{E_m - E_k} \right). \quad (6.106)$$

Положив далее $(E_m - E_n)(T/\hbar) = x$ и $(E_k - E_n)(T/\hbar) = y$, так что $(E_m - E_k)(T/\hbar) = x - y$, получим

$$I = \frac{T}{\hbar} \int_{-\Delta T/\hbar}^{\Delta T/\hbar} \frac{dy}{y} \left(\frac{e^{ix} - 1}{x} - \frac{e^{i(x-y)} - 1}{x-y} \right). \quad (6.107)$$

Этот интеграл легче всего вычислить интегрированием по контуру, считая y комплексной переменной и деформируя контур интегрирования. Вместо интегрирования по прямой от $-\Delta T/\hbar$ до $\Delta T/\hbar$ будем интегрировать по полуокружности радиуса $\Delta T/\hbar$ ниже действительной оси. Поскольку отношение $\Delta T/\hbar$ очень велико, а вклад второго члена пренебрежимо мал и поскольку

$$\int_{-\Delta T/\hbar}^{\Delta T/\hbar} \frac{dy}{y} = i\pi,$$

мы получим $I = i\pi (T/\hbar) (e^{ix} - 1)/x$. Складывая части A и B , получаем, наконец, выражение для амплитуды

$$(a + i\pi b) \frac{(e^{ix} - 1)T}{x\hbar}. \quad (6.108)$$

Соответствующая вероятность перехода имеет вид (6.86), где

$$M_{n \rightarrow m} = a + i\pi b = V_{mn} + \sum_k V_{mk} V_{kn} \left[\text{PP} \frac{1}{E_k - E_n} + i\pi (E_k - E_m) \right]. \quad (6.109)$$

Подобно тому как это уже было сделано в соотношении (6.100), последнюю скобку можно записать как $(E_k - E_m - i\varepsilon)^{-1}$, где необходимо взять предел при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Из формулы (6.100) мы видели, что даже в том случае, когда невозможен прямой переход $n \rightarrow m$ из состояния n в состояние m , тем не менее можно допустить, что такой переход может осуществляться через некоторое так называемое *промежуточное* состояние.

Этот процесс можно себе представить следующим образом: система, которая находилась первоначально в состоянии n , переходит из этого состояния в некоторое промежуточное состояние k и затем уже из состояния k переходит в конечное состояние m . Амплитуда такого опосредствованного перехода определяется формулой (6.99). Однако физически неправильно было бы говорить, что рассматриваемый процесс действительно осуществляется через то или иное промежуточное состояние k ; фактически это утверждение лишь отражает тот факт, что в характеристиках поведения квантовомеханической системы имеются определенные амплитуды вероятности переходов через различные промежуточные состояния k и что вклады от этих амплитуд интерферируют друг с другом¹⁾.

Энергия промежуточных состояний не совпадает с энергией начального и конечного состояний; тем не менее закон сохранения энергии здесь не нарушается, поскольку система пребывает в промежуточном состоянии лишь кратковременно. Величина вклада в общую сумму в этом случае убывает обратно пропорционально разности энергий. Об этих промежуточных состояниях мало что можно сказать. Они возникают лишь при рассмотрении потенциала V как возмущения системы с гамильтонианом H , когда реальные состояния системы с гамильтонианом $H + V$ выражаются только лишь через состояния системы с гамильтонианом H . Если в задаче используется другое разбиение на «возмущенную» и «невозмущенную» системы, то в нашем описании появятся другие формулы и другие промежуточные состояния. Много интересных эффектов возникает в случае, когда потенциал зависит от времени (например, периодически). Большинство из них наблюда-

¹⁾ Иными словами, даже в случае, когда невозможен прямой переход $n \rightarrow m$, имеется конечная вероятность найти систему в состоянии m , находившуюся первоначально в состоянии n , что можно понимать как переход в состояние m через некоторое промежуточное состояние. — Прим. ред.

лось в микроволновых экспериментах, где в качестве возмущения $V(x, t)$ применялось слабое и периодически изменяющееся во времени электрическое или магнитное поле.

Задача 6.27. Для потенциалов, периодически изменяющихся во времени, получите ряд теории возмущений до членов второго порядка включительно.

Иногда переход может происходить лишь через два или большее число промежуточных состояний. Анализ таких переходов требует рассмотрения в ряде теории возмущений членов третьего и более высоких порядков.

Задача 6.28. Покажите, что в случае, когда невозможен ни прямой переход, ни переход через одно промежуточное состояние и требуется рассматривать сразу два промежуточных состояния, матричный элемент перехода имеет вид

$$M_{n \rightarrow m} = \sum_k \sum_l \frac{V_{mk} V_{kl} V_{ln}}{(E_m - E_k)(E_m - E_l)}, \quad (6.110)$$

что соответствует члену третьего порядка в разложении теории возмущений.

Задача 6.29. Предположим, что одновременно действуют два возмущения: $V(x, t)$ и $U(x, t)$, которые представляют собой, например, некоторую комбинацию постоянного и переменного электрических полей или комбинацию электрического и магнитного полей. Предположим далее, что ни одно из этих возмущений V или U порознь не может вызвать переход системы из одного состояния в другое. Это становится возможным, лишь когда оба возмущения действуют совместно. Полагая возмущения V и U не зависящими от времени, покажите, что матричный элемент перехода определяется выражением

$$M_{m \rightarrow n} = \sum_k \frac{V_{mk} U_{kn} + U_{mk} V_{kn}}{E_m - E_k}. \quad (6.111)$$

Допустим теперь, что оба потенциала изменяются периодически во времени, но с различными частотами ω_1 и ω_2 . Каков будет в этом случае матричный элемент?

Расчет сдвига энергии состояния. При вычислении амплитуд переходов мы рассматривали лишь те состояния, у которых $n \neq m$. Обратимся теперь к случаю, когда $m = n$. Рассмотрев члены нулевого и первого порядков в разложении теории возмущений,

имеем

$$\lambda_{mm} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^T V_{mm}(t) dt. \quad (6.112)$$

Если V не зависит от времени, то $\lambda_{mm} = 1 - (i/\hbar) V_{mm}T$. Что означает этот результат? Можно ожидать, что добавка к основному гамильтониану потенциала V приведет к тому, что энергии всех состояний системы несколько изменятся. Новые значения энергий можно записать как $E_m + \Delta E_m$. Зависящая от времени часть волновой функции, описывающей это состояние, будет теперь иметь вид $\exp [(-i/\hbar)(E_m + \Delta E_m)t]$ вместо экспоненты $\exp(-i/\hbar)E_mt$, которая была раньше.

Вследствие этого за время T , в течение которого действует возмущающий потенциал, возникает относительная разность фаз, выражаемая экспоненциальным множителем

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta E_m T\right).$$

С точностью до первого порядка разложение этого множителя в ряд по времени имеет вид $1 - (i/\hbar) \Delta E_m T$. Отсюда видно, что в первом порядке величина сдвига энергии в состоянии m , обусловленная потенциалом V , составляет

$$\Delta E_m = V_{mm}. \quad (6.113)$$

Такой вывод выражения для сдвига энергии в первом порядке теории возмущений неудовлетворителен в случае, когда система вырождена, т. е. если вначале имеется очень много состояний с одной и той же энергией. Оказывается, в этом случае члены второго порядка по V дают эффекты такой же величины, что и члены первого. Учет членов второго порядка в разложении матричного элемента перехода дает

$$\begin{aligned} e^{-(i/\hbar)E_m T} \lambda_{mm} &= 1 - \frac{i}{\hbar} V_{mm} T - \left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \times \\ &\times \sum_k \int_0^T \int_0^{t_4} e^{-(i/\hbar)(E_k - E_m)(t_4 - t_3)} dt_3 dt_4 V_{mk} V_{km}. \end{aligned} \quad (6.114)$$

Предположим сначала, что вырождения нет. Рассмотрим первый член ряда при $k = m$, который является членом второго порядка. Интеграл в этом члене равен $T^2/2$. Интегралы в членах с $k \neq m$ могут быть также легко вычислены:

$$\begin{aligned} e^{-(i/\hbar)E_m T} \lambda_{mm} &= 1 - \frac{i}{\hbar} V_{mm} T - \frac{1}{2\hbar^2} V_{mm}^2 T^2 - \\ &- \sum_{k \neq m} \frac{i |V_{km}|^2}{(E_m - E_k) \hbar} \left\{ T - \frac{1 - \exp[-iT(E_k - E_m)/\hbar]}{(i/\hbar)(E_k - E_m)} \right\}. \end{aligned} \quad (6.115)$$

Первые три члена в правой части этого уравнения представляют собой просто разложение экспоненты $\exp(-iV_{mm}T/\hbar)$. Первый из суммируемых членов будет пропорционален T , и его можно интерпретировать как изменение энергии во втором порядке разложения. Это означает, что добавка к энергии не просто равна V_{mm} , а содержит еще поправки высшего порядка. С учетом поправок второго порядка выражение для сдвига энергии запишется в виде

$$\Delta E_m = V_{mm} - \sum_{k \neq m} \frac{V_{mk}V_{km}}{E_m - E_k}. \quad (6.116)$$

Во втором порядке это равенство дает точное выражение для сдвигов уровней энергии невырожденных состояний. Следует заметить, что этот результат легче получить обычными методами, т. е. решая уравнение

$$(H + V)\varphi = E\varphi. \quad (6.117)$$

Более того, обычный подход, основанный на уравнении (6.117), позволяет проще трактовать вырожденные состояния. Однако нашей целью здесь было привести пример использования амплитуды перехода, а не отыскивать простейшие формулы для расчета энергетических сдвигов.

В действительности имеются более сложные задачи, связанные с изменением энергии, в применении к которым метод амплитуд перехода оказывается наипростейшим. В этих задачах схема, которую мы старались пояснить выше, сводится к нахождению членов ряда, пропорциональных T , T^2 и т. д. Затем, если мы вспомним, что амплитуда вероятности пребывания системы в начальном состоянии пропорциональна экспоненте $\exp(-i\Delta E T/\hbar)$ и что ряд теории возмущений эквивалентен разложению этой экспоненты, мы сможем написать правильное выражение для ΔE .

До сих пор мы еще не рассмотрели последний член в формуле (6.115). Если состояние E_k лежит в непрерывном спектре, мы должны определить смысл знаменателей в формуле (6.116). Если мы будем понимать их в смысле главного значения, как мы это делали при рассмотрении членов второго порядка в случае $n \neq m$, то можно показать, что эти дополнительные члены дадут вклад, пропорциональный T , и приведут к поправке в уравнении (6.116)

$$\Delta E_m = -i\pi \sum_k \delta(E_m - E_k) V_{mk}V_{km}. \quad (6.118)$$

Однако эта величина не может быть поправкой к энергии, так как она чисто мнимая, а энергия должна быть действительной величиной. Обозначим эту поправку через $-i\gamma/2$ (множитель $1/2$

вводится для удобства) и запишем

$$\Delta E_m - \frac{i\gamma}{2} = V_{mm} - \sum_k \frac{|V_{mk}|^2}{E_m - E_k - i\varepsilon}. \quad (6.119)$$

Отсюда следует, что амплитуда перехода λ_{mm} , означающая, что система очень долго будет оставаться в состоянии m , пропорциональна экспоненте

$$\exp \left[-i \left(\Delta E_m - \frac{i\gamma}{2} \right) T \right] = \exp [-i (\Delta E_m) T] \exp \left(-\frac{\gamma T}{2} \right).$$

Первый множитель здесь определяет сдвиг энергии. Вторым множителем легко интерпретировать как вероятность того, что через время T система по-прежнему будет пребывать в состоянии m ; эта вероятность равна $|\lambda_{mm}|^2 = \exp(-\gamma T)$ и убывает со временем, так как в каждый момент времени имеется определенная вероятность перехода системы из состояния m в некоторое другое состояние. Это означает, что для полной согласованности следует допустить, что величина γ является полной вероятностью (в расчете на единицу времени) перехода из состояния m в некоторое состояние, принадлежащее непрерывному спектру при той же самой энергии. Из уравнения (6.118) следует, что

$$\gamma = \sum_k 2\pi \delta(E_m - E_k) |V_{mk}|^2. \quad (6.120)$$

Итак, мы видим, что полная вероятность, отнесенная к единице времени, в точности совпадает с суммой в формуле (6.87), взятой по всем допустимым конечным состояниям (допустимым в рассматриваемом приближении по V).

Величина, обратная γ , называется средним временем жизни состояния. Строго говоря, состояние с конечным временем жизни не имеет определенной энергии. В соответствии с принципом Гейзенберга неопределенность энергии $\Delta E = (\hbar/\text{время жизни})$, т. е. $\Delta E = \gamma$.

Если поставить эксперимент для определения различия энергий двух уровней, каждый из которых имеет ширину γ , то мы обнаружим, что резонанс не является острым, а имеет сглаженную форму. Центр резонансного пика определяет разность энергий, а его ширина — сумму значений γ для данных двух уровней.

МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ПЕРЕХОДА

В гл. 6, рассматривая вопросы, связанные с изменением состояний квантовомеханической системы, мы развивали общие представления теории возмущений. В связи с этим мы рассмотрели и исследовали системы, основное состояние которых описывается постоянным во времени гамильтонианом. Теперь продолжим изучение метода теории возмущений и обобщим его на случай систем, у которых невозмущенное состояние описывается гамильтонианом, изменяющимся со временем. С этой целью введем более общие обозначения и попытаемся несколько шире рассмотреть вопрос о том, каким образом происходит изменение состояния квантовомеханической системы. Эти новые обозначения будут введены в переменные и некоторые специальные функции, так называемые *матричные элементы перехода*.

Всю эту главу можно разделить на четыре части. Вначале дадим определение амплитуд и матричных элементов перехода на основе теории возмущений, развитой в гл. 6. Во второй части, охватывающей § 2—4, сформулируем некоторые представляющие общий интерес соотношения для матричных элементов перехода. В третьей части (§ 5) покажем, как связаны между собой матричные элементы перехода, определенные с помощью интегралов по траекториям, и величины, описывающие то же явление, но определенные с помощью обычных квантовомеханических операторов. Наконец, в последней части (§ 6 и 7) применим результаты предыдущих параграфов к решению двух частных интересных квантовых задач.

§ 1. Определение матричных элементов перехода

Изменение квантовомеханической системы во времени можно представить себе следующим образом. В начальный момент t_1 состояние описывается волновой функцией $\psi(x_1, t_1)$. В более поздний момент времени t_2 это начальное состояние переходит в состояние $\phi(x_2, t_2)$.

Предположим, что в момент t_2 мы задаем вопрос: какова вероятность найти систему в некотором состоянии $\chi(x_2, t_2)$? Как мы знаем из общих соображений, развитых в гл. 5, вероятность того, что система будет находиться в определенном состоянии,

пропорциональна квадрату модуля амплитуды, определяемой интегралом

$$\int \chi^*(x_2, t_2) \varphi(x_2, t_2) dx_2.$$

Из гл. 3 нам также известно, что функция φ может быть выражена через начальную волновую функцию с помощью ядра K , описывающего движение системы в интервале между моментами времени t_1 и t_2 . Поэтому при отыскании вероятности пребывания системы в каком-то определенном состоянии можно исходить из начальной волновой функции ψ , учитывая зависимость от времени с помощью ядра K (2,1).

Результирующую амплитуду, абсолютная величина которой дает искомую вероятность, назовем *амплитудой перехода* и обозначим ее так:

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle = \int \int \chi^*(x_2) K(2, 1) \psi(x_1) dx_2 dx_1. \quad (7.1)$$

При описании процесса перехода для нас было бы сейчас предпочтительнее вернуться к более общим обозначениям. Введем для этого снова функцию действия S , описывающую поведение системы в интервале между двумя моментами времени, и запишем амплитуду перехода в виде.

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle_S = \int \int_{x_1}^{x_2} \chi^*(x_0) e^{iS/\hbar} \psi(x_1) \mathcal{D}x(t) dx_1 dx_2. \quad (7.2)$$

Здесь мы применяем более точное обозначение, добавив в амплитуду перехода индекс S , чтобы указать величину действия, входящего в интеграл. Этот интеграл необходимо взять по всем траекториям, которые соединяют точки x_1 и x_2 , результат умножить на две волновые функции и затем еще раз проинтегрировать по всем пространственным переменным в указанных пределах.

Прежде чем пойти дальше, договоримся о новых, лучших обозначениях, с тем чтобы охватить более общие случаи. Введем функционал $F[x(t)]$, не касаясь пока его физической природы. С помощью этого функционала определим матричный элемент перехода как

$$\langle \chi | F | \psi \rangle_S = \int \int \chi^*(x_2) F[x(t)] e^{iS/\hbar} \psi(x_1) \mathcal{D}x(t) dx_1 dx_2. \quad (7.3)$$

Здесь F — некоторый функционал от $x(t)$, не зависящий от значений функции $x(t)$ на границе и вне области изменения переменных x_1 и x_2 . В частном случае, когда $F = 1$, интеграл (7.3) определяет амплитуду перехода.

Матричные элементы перехода трудно представить себе, если опираться на интуитивные понятия. Поэтому для того, чтобы хотя бы частично использовать такие понятия, обычно обращаются к некоторой классической аналогии. Рассмотрим, например, картину броуновского движения какой-то очень маленькой частицы. Пусть в некоторый начальный момент $t = t_1$ эта частица находится в точке x_1 и мы ищем вероятность того, что частица достигнет точки x_2 в момент $t = t_2$. В случае квантовомеханических частиц мы обычно говорим о переходе из начального в некоторое конечное состояние. Поэтому точка x_1 для броуновской частицы соответствует начальной волновой функции $\psi(x_1)$ в выражении (7.2), а точка x_2 — функции $\chi(x_2)$. Далее, решение квантовомеханической задачи требует интегрирования по переменным x_1 и x_2 начального и конечного состояний — шаг, совершенно ненужный в нашей классической задаче.

Классическую задачу можно решить, рассматривая все возможные траектории движения частиц. При этом мы должны были бы вклад каждой траектории брать с весом, равным вероятности того, что частица действительно следует вдоль такой траектории, и вычислить интеграл по всем траекториям. Весовая функция здесь будет соответствовать члену $e^{iS/\hbar}$, входящему в интеграл (7.2).

Конечное положение частицы в такой задаче не будет определяться отдельной точкой, а выразится некоторой малой окрестностью точки x_2 (от x_2 до $x_2 + dx$). После соответствующей нормировки результат будет иметь вид функции распределения $P(x_2) dx_2$, определяющей вероятность достижения бесконечно малой окрестности точки x_2 . Эта функция является аналогом амплитуды перехода (7.2) в случае, когда ψ и χ являются δ -функциями пространственных координат.

Допустим теперь, что мы хотим узнать о движении несколько больше, чем просто относительную вероятность достижения точки x_2 : например, мы хотели бы найти ускорение, которое будет иметь частица через некоторое определенное время (скажем, 1 сек) после начала движения. Для этого нам нужно было бы знать вероятные значения всех ускорений, т. е. величину ускорения для каждой возможной траектории, взятую с весом, равным вероятности движения вдоль этой траектории. Такая усредненная величина будет соответствовать матричному элементу перехода (7.3). Суть этого утверждения заключается в том, что в подынтегральную функцию соотношения (7.3) мы вместо функции $F[x(t)]$ должны подставить ускорение, взятое в некоторый момент времени t . С помощью интегралов по траекториям решение классической задачи можно представить в виде, очень похожем на соотношение (7.3).

Далее в этой главе мы будем пользоваться подобной аналогией и время от времени будем рассматривать матричные элементы перехода как «взвешенные средние». Необходимо, однако, помнить, что весовая функция в квантовой механике является комплексной величиной и поэтому результат не будет «средним» в обычном смысле этого слова.

Описание броуновского движения методом интегралов по траекториям, как это было показано в нашей классической аналогии, действительно является очень мощным методом. Детально это будет рассмотрено в гл. 12, а сейчас мы с помощью теории возмущений, развитой в гл. 6, попытаемся еще несколько прояснить смысл матричного элемента перехода.

Случай малых возмущений. Предположим, что действие, описывающее движение системы, можно разделить на две части: $S = S_0 + \sigma$, где S_0 приводит лишь к простым интегралам по траекториям, в то время как оставшаяся часть σ достаточно мала и мы можем применить метод теории возмущений. Экспоненциальную функцию в соотношении (7.2) представим в виде

$$e^{iS/\hbar} = e^{iS_0/\hbar} e^{i\sigma/\hbar}. \quad (7.4)$$

Учитывая теперь соотношение (7.3), запишем матричный элемент перехода (7.2) в виде

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle_{S_0 + \sigma} = \langle \chi | e^{i\sigma/\hbar} | \psi \rangle_{S_0}, \quad (7.5)$$

а после разложения экспоненты в ряд получим

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle_{S_0 + \sigma} = \langle \chi | 1 | \psi \rangle_{S_0} + \frac{i}{\hbar} \langle \chi | \sigma | \psi \rangle_{S_0} - \frac{1}{2\hbar^2} \langle \chi | \sigma^2 | \psi \rangle_{S_0} + \dots \quad (7.6)$$

Этот ряд является обобщением разложения (6.3) и может рассматриваться как основа теории возмущений. Отсюда можно получить матричные элементы перехода, встречающиеся в целом ряде квантовомеханических задач.

Предположим, что возмущающий потенциал и обусловленная им часть функции действия σ связаны соотношением

$$\sigma = \int V[\chi(t), t] dt. \quad (7.7)$$

В этом случае в первом приближении получим матричный элемент перехода

$$\langle \chi | \sigma | \psi \rangle_{S_0} = \int \langle \chi | V[x(t), t] | \psi \rangle_{S_0} dt. \quad (7.8)$$

Чтобы вычислить его, нужно взять интеграл

$$\begin{aligned} & \langle \chi | V[x(t), t] | \psi \rangle_{S_0} = \\ & = \int \int_{x_1}^{x_2} \int \chi^*(x_2) e^{iS_0/\hbar} V[x(t), t] \psi(x_1) dx_1 dx_2 \mathcal{D}x(t). \end{aligned} \quad (7.9)$$

Первый шаг при вычислении этого интеграла в точности совпадает с тем, что мы делали в соотношениях (6.8) — (6.11) при вычислении ядра $K^{(1)}$. Выражение для интеграла по траекториям получается путем интегрирования по координатам обеих конечных точек x_1 и x_2 и по координатам промежуточной точки x_3 [обозначенной в соотношении (6.10) через c]. Таким образом,

$$\langle \chi | V[x(t), t] | \psi \rangle_{S_0} = \int \chi^*(x_2) K_0(2, 3) V(3) K_0(3, 1) \psi(x_1) dx_1 dx_2 dx_3. \quad (7.10)$$

Мы получили это выражение, основываясь на трех допущениях: во-первых, применили интегральное правило (3.42) для волновой функции; далее, для написания амплитуды мы взяли выражение (5.31), определяющее вероятность того, что система, находящаяся в каком-то определенном состоянии, может быть найдена и в некотором другом состоянии; наконец, для ядра, описывающего движение системы, употребили первое приближение теории возмущений (6.11). Все это в совокупности определяет матричный элемент перехода (7.10). Квадратмодуль этого выражения представляет собой вероятность того, что система, находившаяся в исходном состоянии ψ , может под действием малого возмущающего потенциала $V(x, t)$ перейти далее в состояние χ (если это последнее не является состоянием системы при $V = 0$, т. е. если $\langle \chi | 1 | \psi \rangle = 0$).

Соотношение (3.42) позволяет нам ввести сокращенные обозначения подобно тому, как это было сделано в соотношении (6.23) при переходе к выражению (6.25). Определим функцию $\psi(x_3, t_3)$ как

$$\psi(3) = \int K_0(3, 1) \psi(x_1) dx_1. \quad (7.11)$$

Это — волновая функция в момент t_3 , возникающая из начальной волновой функции в случае, когда нет возмущения. Аналогично определим функцию

$$\chi^*(x_3, t_3) = \int \chi^*(x_2) K_0(2, 3) dx_2, \quad (7.12)$$

комплексно сопряженную волновой функции, которая (при отсутствии возмущения) в момент t_3 будет совпадать с функцией $\chi(x_2)$ в момент t_2 [см. уравнение (4.38) и задачу 4.7].

С помощью вновь введенных волновых функций член первого порядка теории возмущений можно записать более просто:

$$\langle \chi | \int V[x(t), t] dt | \psi \rangle_{s_0} = \int \int \chi^3(3) V(3) \psi(3) dx_3 dt_3, \quad (7.13)$$

откуда видно, что амплитуда перехода, представленная в такой форме, является обобщением амплитуды перехода λ_{mn} , введенной в § 5 гл. 6. Если волновые функции в правой части соотношения (7.13) являются собственными функциями, то результирующая амплитуда перехода будет просто совпадать с амплитудой λ_{mn}^1 , определяемой соотношением (6.70).

Таким образом, вычисление элемента перехода для функционала $F[x(t)]$, зависящего от времени t только через $x(t)$, как и вычисление интеграла по времени от такого функционала, не вызывает затруднений. Легко вычисляется и элемент перехода для функционалов, зависящих от функций x , определенных для двух разных моментов времени. Такая задача встречается, например, при рассмотрении члена второго порядка ряда теории возмущений. Этот член можно записать в виде

$$\frac{1}{2\hbar^2} \langle \chi | \sigma^2 | \psi \rangle_{s_0} = \frac{1}{2\hbar^2} \int \int \langle \chi | V[x(t), t] V[x(s), s] | \psi \rangle dt ds. \quad (7.14)$$

Подынтегральное выражение в этом соотношении само по себе является матричным элементом перехода и может быть представлено как

$$\begin{aligned} & \langle \chi | V[x(t), t] V[x(s), s] | \psi \rangle = \\ & = \int \int \chi^*(4) V(4) K_0(4, 3) V(3) \psi(3) dx_3 dx_4, \end{aligned} \quad (7.15)$$

где мы обозначили $t_3 = s$; $t_4 = t$ для случая $s < t$ и $t_3 = t$; $t_4 = s$ для $s > t$.

Таким образом, член второго порядка в разложении теории возмущений имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\hbar^2} \left\langle \chi \left| \int V[x(t), t] dt \int V[x(s), s] ds \right| \psi \right\rangle = \\ & = \int \int \chi^*(4) V(4) K_0(4, 3) \psi(3) dx_3 dt_3 dx_4 dt_4, \end{aligned} \quad (7.16)$$

что можно понимать как обобщение амплитуды перехода (6.74). Нетрудно написать также выражения, содержащие три или более функций.

Соотношение (7.4) соответствует и более общему виду теории возмущений. Для примера рассмотрим частицу, взаимодействующую с каким-либо осциллятором. После интегрирования по координатам осциллятора результирующую функцию действия можно

написать как $S_0 + \sigma$, где (см. § 10 гл. 3)

$$\sigma = \frac{1}{m \omega \sin \omega T} \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_1}^t g[x(t), t] g[x(s), s] \sin \omega(t_2 - t) \sin \omega(s - t_1) ds dt. \quad (7.17)$$

Функционал $g[x(t), t]$ здесь характеризует взаимодействие частицы и осциллятора; $T = t_2 - t_1$.

Как уже отмечалось, практическое вычисление интегралов по траекториям, содержащих такую сложную функцию действия, очень затруднительно, однако если можно ожидать, что эффект, вызываемый сложным членом σ , невелик, то искомый результат легко получить, разложив экспоненту (7.4) в ряд по возмущениям. Для иллюстрации найдем член первого порядка в таком разложении (т. е. первую борновскую поправку). Используя для δ выражение (7.17), можно вычислить член $(i/\hbar) \langle \chi | \delta | \psi \rangle_{S_0}$, записав его в виде

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle \chi | \sigma | \psi \rangle_{S_0} &= \frac{1}{\hbar m \omega \sin \omega T} \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_1}^t \langle | g[x(t), t] g[x(s), s] | \psi \rangle_{S_0} \times \\ &\times \sin \omega(t_2 - t) \sin \omega(s - t_1) ds dt, \end{aligned} \quad (7.18)$$

так что наиболее трудная часть задачи сводится к отысканию выражения $\langle \chi | g[x(t), t] g[x(s), s] | \psi \rangle_{S_0}$.

Но это выражение мы уже встречали в соотношении (7.15), с той лишь разницей, что вместо g там стояло V . Поэтому мы можем написать

$$\begin{aligned} &\langle \chi | g[x(t), t] g[x(s), s] | \psi \rangle_{S_0} = \\ &= \int \int \chi^*(4) g[x(t_4), t_4] K_0(4, 3) g[x(t_3), t_3] \psi(3) dx_3 dx_4. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Подставив результат в соотношение (7.18), получим окончательное выражение для первой борновской поправки $(i/\hbar) \langle \chi | \sigma | \psi \rangle_{S_0}$.

Заметим, что с матричными элементами перехода мы будем часто встречаться в дальнейшем и в каждом случае их можно будет вычислить так, как только что было показано. Поэтому лишь малая часть излагаемого ниже окажется существенной для дальнейшего рассмотрения. Тем не менее существуют веские соображения, исходя из которых мы и включили этот материал в нашу книгу. Во-первых, возникает возможность получить весьма общие соотношения между матричными элементами перехода, которые можно было бы рассматривать в качестве отправной точки для нового построения квантовой механики. Во-вторых, для тех, кто хорошо знаком с более привычным операторным изложением квантовой механики, мы предлагаем нечто вроде

пособия для перевода с одного языка на другой, что поможет перейти от обычного представления к представлению, используемому в данной книге, т. е. к выражениям, подобным (7.3).

Пользуясь этими правилами перевода, содержание последующих глав, изложенное на языке интегралов по траекториям, можно понять и перевести на язык более привычных символов.

Соотношения, рассматриваемые ниже в данной главе, не зависят от вида волновых функций, описывающих начальное или конечное состояние системы; вид этих функций важен лишь при определении интеграла для матричного элемента перехода. Поэтому применим сокращенные обозначения, опустив все, что характеризует волновые функции; матричный элемент перехода будет теперь обозначаться как $\langle F \rangle_S$ вместо старого обозначения $\langle \chi | F | \psi \rangle_S$.

§ 2. Функциональные производные

Обратимся теперь к рассмотрению математического аппарата, который позволит нам в дальнейшем установить интересное соотношение между матричными элементами перехода. Это соотношение приобретает наиболее изящный вид, если воспользоваться понятием функциональной производной. Поскольку с этим математическим понятием знакомы далеко не все, мы целиком посвятим этот параграф его обсуждению.

Численное значение функционала $F[x(t)]$ определено для каждой заданной функции $x(t)$. Зададимся вопросом: как изменится это значение, если немного изменить аргументную функцию $x(t)$? Другими словами, как велика будет разность $F[x(t) + \eta(t)] - F[x(t)]$, если $\eta(t)$ мало? В первом приближении по η (предполагая, что таковое существует и т. д.) эта разность представляет собой некоторое линейное относительно η выражение типа $\int K(s) \eta(s) ds$. Определенная таким образом величина $K(s)$ называется функциональной производной функционала F по функции $x(t)$ в точке s и обозначается как $\delta F / \delta x(s)$. Поэтому с точностью до членов первого порядка можно записать соотношение

$$F[x + \eta] = F[x] + \int \frac{\delta F}{\delta x(x)} \eta(s) ds + \dots \quad (7.20)$$

Понятно, что производная $\delta F / \delta x(s)$ зависит как от вида функции $x(t)$, так и от значения переменной s , т. е. она является функционалом от $x(t)$ и функцией времени s .

Можно посмотреть на все это и с другой точки зрения. Предположим, что время разделено моментами t_i на очень много маленьких отрезков $\Delta t = \varepsilon (t_{i+1} = \varepsilon + t_i)$. В этом случае функцию

$x(t)$ можно приближенно задать ее значениями $x_i = x(t_i)$ в моменты t_i . Функционал $F[x(t)]$ будет тогда зависеть от всех величин x_i , т. е. он превращается в обычную функцию многих переменных x_i :

$$F[x(t)] \rightarrow F(\dots, x_i, x_{i+1}, \dots). \quad (7.21)$$

Рассмотрим теперь $\partial F / \partial x_i$ — частную производную этой функции по одному из переменных x_i . Наша функциональная производная есть не что иное, как в точности эта частная производная, поделенная на ε и взятая в точке $t_i = s$, т. е.

$$\frac{\delta F}{\delta x(s)} \rightarrow \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial F}{\partial x_i}. \quad (7.22)$$

В этом легко убедиться следующим образом. Если траекторию $x(t)$ заменить на $x(t) + \eta(t)$, то все значения x_i заменятся на $x_i + \eta_i$, где $\eta_i = \eta(t_i)$, поэтому в первом приближении получаем

$$F(\dots x_i + \eta_i, x_{i+1} + \eta_{i+1}, \dots) - F(\dots x_i, x_{i+1}, \dots) = \sum_i \frac{\partial F}{\partial x_i} \eta_i, \quad (7.23)$$

что следует из обычных правил вычисления частных производных. Если теперь обозначить $(1/\varepsilon) (\partial F / \partial x_i) = K_i$, то сумма в (7.23) запишется как $\sum_i K_i \eta_i \varepsilon$ и в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ перейдет в интеграл $\int K(t) \eta(t) dt$, так что если этот предел существует, то он равен функциональной производной $\delta F / \delta x(s)$.

Можно также воспользоваться понятием дифференциала. При этом сразу пишется выражение

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i,$$

и для первой вариации любого заданного функционала F получим

$$\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta x(s)} \delta x(s) ds, \quad (7.24)$$

где $\delta x(s)$ — вариация траектории $x(s)$.

Задача 7.1. Для действия, заданного в виде $S = \int_{t_1}^{t_2} L(\dot{x}, x, t) dt$, покажите, что в любой точке s между t_1 и t_2 выполняется равенство

$$\frac{\delta S}{\delta x(s)} = - \frac{d}{ds} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) + \frac{\partial L}{\partial x}, \quad (7.25)$$

где все частные производные взяты при $t = s$.

Задача 7.2. Покажите, что при $F[x] = x(\tau)$

$$\frac{\delta F}{\delta x(s)} = \delta(\tau - s). \quad (7.26)$$

Задача 7.3. Покажите, что если

$$F = \exp \left[\frac{1}{2} \int \dots \int j(\mathbf{r}_1, t_1) j(\mathbf{r}_2, t_2) \times \right. \\ \left. \times R(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t_1 - t_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 dt_1 dt_2 \right],$$

то производная $\delta F / \delta j(\mathbf{r}, s)$ будет иметь вид

$$\frac{\delta F}{\delta j(\mathbf{r}, s)} = \left[- \int R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', s - t') j(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt' \right] F. \quad (7.27)$$

Заметим, что $j(\mathbf{r}, t)$ является функцией четырех переменных (x, y, z, t) . Поэтому для описания точки, в которой берется функциональная производная, координату s в интегралах [вида, например, соотношения (7.14)] надо заменить набором всех четырех этих аргументов.

Общее соотношение между функционалами, о котором мы упоминали в начале этого параграфа, можно получить, разлагая в ряд матричный элемент перехода функциональной производной $\delta F / \delta x(s)$. Сделать это легче всего следующим образом. Рассмотрим матричный элемент

$$\langle F \rangle_S = \int F[x(t)] e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t) \quad (7.28)$$

и в интеграле по траекториям функцию $x(t)$ заменим на $x(t) + \eta(t)$. Для каждого фиксированного значения $\eta(t)$ выполнено равенство $\mathcal{D}[x(t) + \eta(t)] = \mathcal{D}x(t)$ [поскольку $d(x_i + \eta_i) = dx_i$]. Отметим, что сам интеграл не должен измениться от такой замены. Разлагая теперь экспоненту в ряд и ограничиваясь членами нулевого и первого порядков

$$\langle F \rangle_S = \int F[x(t) + \eta(t)] e^{(i/\hbar)S[x(t) + \eta(t)]} \mathcal{D}x(t) = \\ = \int F[x(t)] e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t) + \int \left[\int \frac{\delta F}{\delta x(s)} \eta(s) ds \right] e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t) + \\ + \frac{i}{\hbar} \int F[x(t)] \left[\int \frac{\delta S}{\delta x(s)} \eta(s) ds \right] e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t) + \dots, \quad (7.29)$$

получаем, что член нулевого порядка в точности равен $\langle F \rangle_S$. Поэтому сумма членов первого порядка при любой функции $\eta(s)$ должна обращаться в нуль. Отсюда следует соотношение

$$\left\langle \frac{\delta F}{\delta x(s)} \right\rangle_S = -\frac{i}{\hbar} \left\langle F \frac{\delta S}{\delta x(s)} \right\rangle_S. \quad (7.30)$$

Из этого общего соотношения вытекает много важных следствий. Так, его можно было бы использовать в качестве отправной точки для вывода законов квантовой механики; можно было бы вернуться несколько назад и еще раз получить выражение (7.6). Если речь идет о каком-то обобщении квантовой механики, то можно предполагать, что это обобщение содержится в функции S , в экспоненте $e^{iS/\hbar}$, или же исходить из выражения, подобного соотношению (7.30), и вводить обобщение в дифференциальной форме. Швингер исследовал различные формулировки квантовой механики, вытекающие из соотношения (7.30).

Можно получить еще одну форму этого соотношения, если проделать разбиение временного интервала на ε -отрезки, а функционалы заменить функциями переменных x_i , соответствующих моментам t_i . Рассматривая далее интеграл по траекториям

$$\int \frac{\partial F}{\partial x_k} e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t), \quad (7.31)$$

где t_k — некоторый промежуточный момент, не являющийся концом временного интервала, мы видим, что этот интеграл является обычным кратным интегралом по аргументам x_i . После одной интеграции по частям получим, отбросив проинтегрированную часть:

$$\int \frac{\partial F}{\partial x_k} e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t) = \frac{i}{\hbar} \int F \frac{\partial S}{\partial x_k} e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t). \quad (7.32)$$

Задача 7.4. Выясните, почему обращается в нуль проинтегрированная часть.

Окончательно имеем

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x_k} \right\rangle_S = -\frac{i}{\hbar} \left\langle F \frac{\partial S}{\partial x_k} \right\rangle_S. \quad (7.33)$$

Это выражение имеет тот же смысл, что и соотношение (7.30). Более удобно записать его в дифференциальной форме

$$\langle \delta F \rangle_S = -\frac{i}{\hbar} \langle F \delta S \rangle_S, \quad (7.34)$$

так как в этом случае можно не указывать переменных, от которых зависят функции F и S .

Задача 7.5. Покажите, что соотношение (7.34), вообще говоря, может ввести в заблуждение, поскольку в (7.33) используются только прямоугольные координаты. Для этого исследуйте соответствующее соотношение в случае, когда используются, например, сферические координаты и отыскивается производная $\langle dF/dr_k \rangle_S$.

§ 3. Матричные элементы перехода для некоторых специальных функционалов

Соотношение (7.34) имеет много интересных приложений. В этом параграфе мы проанализируем некоторые из них. При этом ограничимся частным случаем одномерного движения частицы под действием потенциала $V[x(t)]$.

Предположим, что вдоль траектории частицы действие задается выражением

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{m\dot{x}^2}{2} - V[x(t)] \right\} dt. \quad (7.35)$$

Если каждая траектория сдвигается на малую величину $\delta x(t)$, то в первом приближении

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} [m\ddot{x} + V'(x)] \delta x(t) dt. \quad (7.36)$$

Из соотношения (7.34) в этом случае следует

$$\langle \delta F \rangle_S = \frac{i}{\hbar} \left\langle F \int_{t_1}^{t_2} [m\ddot{x} + V'(x)] \delta x(t) dt \right\rangle. \quad (7.37)$$

Это выражение можно получить и иначе, если встать на точку зрения, применявшуюся нами при выводе формулы (7.33); другими словами, если провести разбиение временного интервала на малые отрезки длиной ε . Действие S в этом случае запишется как

$$S = \sum_{i=1}^{N-1} \left[m \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2\varepsilon} - V(x_i) \varepsilon \right]. \quad (7.38)$$

Если выбрать некоторый момент времени t_k и, как прежде, обозначить через x_k соответствующую точку траектории, то

$$\frac{\partial S}{\partial x_k} = m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) + V'(x_k) \varepsilon. \quad (7.39)$$

Учитывая теперь (7.33), получаем

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x_k} \right\rangle_S = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left\langle F \left[m \left(\frac{x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}}{\varepsilon^2} \right) + V'(x_k) \right] \right\rangle. \quad (7.40)$$

В этом последнем соотношении член, содержащий ε^2 в знаменателе, фактически является ускорением $\ddot{x}$ в момент времени t_k . Поэтому соотношение (7.40) оказывается просто частным случаем выражения (7.37). Оно точно совпадает с последним, если

вариация $\delta x(t)$ равна нулю для всех моментов t , отличных от t_k . Если же в (7.37) положить $\delta x(t)$ равной $\varepsilon \delta x_k \delta(t - t_k)$, то получим соотношение (7.40); поскольку оно справедливо для любых k , то фактически эквивалентно соотношению (7.37), являясь его более подробной записью.

Пусть теперь в соотношении (7.37) мы положили $F \approx 1$. Тогда $\delta F = 0$ и

$$-\frac{i}{\hbar} \left\langle \int [\ddot{m}\dot{x} + V'(x)] \delta x(t) dt \right\rangle = 0. \quad (7.41)$$

Так как этот результат должен быть верен для любого выбора функций $\delta x(t)$, то в любой момент времени будет выполняться равенство

$$\langle \ddot{m}\dot{x} \rangle = -\langle V'(x) \rangle. \quad (7.42)$$

Это выражение является квантовомеханическим аналогом закона Ньютона. Если для матричного элемента перехода воспользоваться классической аналогией, рассмотренной в § 1, то можно сказать, что в каждый момент времени произведение «средней взвешенной» массы на ускорение, «усредненное» по всем траекториям с весом $e^{iS/\hbar}$, равно «среднему» значению силы (т. е. градиенту потенциала, взятому с обратным знаком) в тот же самый момент времени.

В качестве другого примера рассмотрим случай, когда F является произвольным (но не равным тождественно нулю) функционалом от всех пространственных переменных, исключая x_k . Тогда левая часть соотношения (7.40) обращается в нуль (поскольку $dF/dx_k = 0$) и мы имеем

$$\begin{aligned} & \left\langle F(x_1, x_2, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_N) \times \right. \\ & \times \left[m \frac{x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}}{\varepsilon^2} + V'(x_k) \right] \right\rangle = 0. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Из этого соотношения видно, что усредненный по всем траекториям матричный элемент выражения $\ddot{m}\dot{x} + V'(x)$ обращается в нуль в момент t_k даже в том случае, если усреднение проводится с произвольным весом, лишь бы весовой функционал не зависел от точки траектории, относящейся к моменту t_k .

Допустим теперь, что функционал зависит от этой точки; для простоты выберем его, например, равным x_k . Применив соотношение (7.40), получаем

$$\begin{aligned} \langle 1 \rangle &= \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left\langle m x_k \frac{x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}}{\varepsilon^2} + x_k V'(x_k) \right\rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle m x_k \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) + \varepsilon x_k V'(x_k) \right\rangle. \end{aligned} \quad (7.44)$$

Если предположить, что потенциал V — гладкая функция, то в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ величина $\varepsilon x_k V'(x_k)$ станет пренебрежимо малой по сравнению с другими членами и выражение (7.44) принимает вид

$$\left\langle m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} x_k \right\rangle - \left\langle x_k m \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right\rangle = \frac{\hbar}{i} \langle 1 \rangle. \quad (7.45)$$

Последнее соотношение содержит произведение пространственной переменной x и импульса mx . В первом члене импульс линейно усреднен для момента $t_k + \varepsilon/2$, а пространственная переменная относится к моменту t_k . Во втором члене ее значение снова относится к моменту t_k , в то время как значение импульса соответствует моменту $t_k - \varepsilon/2$. Таким образом, из этого уравнения видно, что матричный элемент перехода произведения пространственной координаты и импульса зависит от порядка моментов времени, в которые определялись эти две величины.

Позднее, когда мы перейдем к более привычным операторным обозначениям, будет видно, что оба операторных уравнения, соответствующие уравнению (7.42), и правило коммутации операторов (7.45) получаются из одного и того же фундаментального соотношения (7.34).

Из выражения (7.45) можно сделать дальнейшие выводы, которые дадут нам лучшее представление о свойствах траекторий, играющих важную роль в квантовой механике. Рассмотрим порознь

$$\left\langle x_k m \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right\rangle \quad (7.46)$$

и

$$\left\langle x_{k+1} m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right\rangle. \quad (7.47)$$

Эти члены отличаются один от другого на величину порядка ε , поскольку они представляют собой одну и ту же величину, вычисленную в два различных момента, отличающихся на ε . Поэтому можно подставить выражение (7.47) вместо второго члена соотношения (7.45). В результате получим

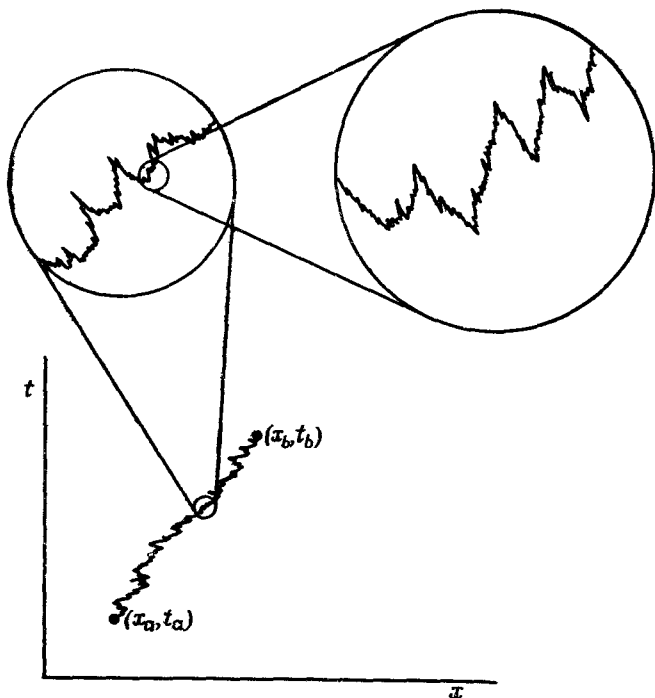
$$\left\langle m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} (x_k - x_{k+1}) \right\rangle = \frac{\hbar}{i} \langle 1 \rangle. \quad (7.48)$$

Можем записать это и по-другому:

$$\left\langle \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 \right\rangle = -\frac{\hbar}{i m \varepsilon} \langle 1 \rangle. \quad (7.49)$$

Отсюда следует, что матричный элемент квадрата скорости имеет порядок $1/\varepsilon$ и неограниченно растет, когда ε стремится к нулю.

Поэтому можно заключить, что основные траектории квантовомеханической частицы не имеют вида гладкой кривой с определенным наклоном (т. е. с определенной скоростью), а изображаются линией с очень мелкими хаотическими изломами, как показано на фиг. 7.1. На самом деле эта хаотичность такова, что если для



Ф и г. 7.1. Типичные траектории квантовомеханической частицы.

Они имеют нерегулярные изломы, если рассматривать их с достаточным увеличением. Таким образом, хотя средняя скорость может быть вычислена, но среднего квадрата скорости не существует. Другими словами, траектории не дифференцируемы.

определения «среднего» воспользоваться классическими понятиями, то «среднеквадратичной» скорости просто не будет существовать.

Если для малого промежутка времени Δt среднюю скорость определить, например, как $[x(t + \Delta t) - x(t)]/\Delta t$, то «среднеквадратичная скорость» для малого интервала времени конечна, но величина ее будет тем больше, чем меньше взятый интервал.

Итак, мы знаем, что квантовомеханические траектории весьма хаотичны. Однако, будучи усредненными по разумному отрезку времени, эти хаотичности приводят к разумной величине дрейфа,

т. е. к «средней скорости», несмотря на то что для коротких временных интервалов такая «средняя» величина скорости очень велика.

Задача 7.6. Покажите, что для частицы, движущейся в трехмерном пространстве (x, y, z) , справедливы соотношения

$$\langle (x_{k+1} - x_k)^2 \rangle = \langle (y_{k+1} - y_k)^2 \rangle = \langle (z_{k+1} - z_k)^2 \rangle = -\frac{\hbar \varepsilon}{im}, \quad (7.50)$$

$$\begin{aligned} \langle (x_{k+1} - x_k)(y_{k+1} - y_k) \rangle &= \langle (x_{k+1} - x_k)(z_{k+1} - z_k) \rangle = \\ &= \langle (y_{k+1} - y_k)(z_{k+1} - z_k) \rangle = 0. \end{aligned} \quad (7.51)$$

Отсюда видно, что матричный элемент кинетической энергии нельзя написать просто как

$$\frac{1}{2} \left\langle m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 \right\rangle, \quad (7.52)$$

поскольку эта величина неограниченно растет при стремлении ε к нулю. Как же получить правильное выражение для кинетической энергии? Сделаем эвристическое предположение, что нам будет достаточно ограничиться рассмотрением тех функционалов F , которые исследуются методами теории возмущений. Тогда возникает вопрос: как ввести понятие возмущения в кинетическую энергию? Пусть за малый интервал времени Δt масса частицы m изменяется на величину ηm (где η тоже очень мало); тогда изменение действия, пропорциональное кинетической энергии, будет равно величине $\eta \Delta t (m/2) \dot{x}^2$. Итак, мы пришли к вопросу: какой вид (в первом приближении по возмущениям) имеет выражение для $\langle \sigma \rangle_{S_0}$, если на короткое время масса частицы m принимает величину $m(1 + \eta)$?

Для простоты интервал Δt можно положить равным ε , как это было уже сделано нами в определении пространственных переменных x_k , и т. д.; тогда в разложении по возмущениям член первого порядка, поделенный на $\varepsilon \eta$, будет равен кинетической энергии частицы. Ясно, что изменение действия S будет равно $\varepsilon \eta (m/2) (x_{k+1} - x_k)^2 / \varepsilon^2$ [если в выражении (7.38) в члене с индексом $i = k$ массу m заменить на $m(1 + \eta)$]. Однако это не единственное изменение в интеграле по траекториям, вызываемое вариацией массы. Дело в том, что, кроме величины самого интеграла, изменяется также (на величину $\eta/2$) коэффициент нормировки A , пропорциональный $m^{1/2}$. Следовательно, полное изменение интеграла по траекториям, обусловленное малой вариацией m , после деления на $\eta \varepsilon$ запишется (с точностью до первого порядка) в виде

$$\frac{i}{\hbar} \left\langle \frac{m}{2} \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{\varepsilon^2} + \frac{\hbar}{2i\varepsilon} \right\rangle, \quad (7.53)$$

а это не что иное, как кинетическая энергия, умноженная на величину $i/\hbar$.

Из равенства (7.49) можно было бы заключить, что это выражение равно нулю. Однако само равенство (7.49) выполняется лишь в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ с точностью до членов порядка $1/\varepsilon$, в то время как (7.53) при таком же предельном переходе остается конечным. Это выражение можно переписать иначе, если разложить квадратичный член. В уравнении (7.40) положим F равным $x_{k+1} - x_k$. Сохраняя члены низшего порядка по ε , получаем

$$\left\langle \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) \right\rangle = \left\langle \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 \right\rangle + \frac{\hbar}{2i\varepsilon} \langle 1 \rangle. \quad (7.54)$$

Таким образом, левую часть уравнения (7.54) можно рассматривать как матричный элемент кинетической энергии. Отсюда видно, что простейший способ написания матричных элементов перехода, содержащих различные степени скоростей, заключается в замене этих степеней произведениями скоростей, в которых каждый множитель немного отличается от другого небольшим сдвигом во времени.

В простых задачах матричные элементы перехода иногда можно вычислить непосредственно. Тот же самый результат в этих задачах можно получить, воспользовавшись соотношениями для матричных элементов перехода, которые мы нашли в § 2. Из этих соотношений получаются разрешимые дифференциальные уравнения для матричных элементов. Для иллюстрации рассмотрим теперь несколько примеров применения нашего общего метода, однако, как будет видно, все задачи, для которых этот метод окажется результативным, настолько просты, что и непосредственное вычисление матричных элементов фактически вряд ли будет сложнее.

В качестве первого примера рассмотрим случай свободной частицы, которая переходит из точки x_1 в точку x_2 за время T . Найдем матричный элемент перехода для пространственной координаты в момент времени t , т. е. для $x(t)$. Конечно, он будет некоторой функцией от t , поэтому ясно, что

$$\langle x(0) \rangle = x_1 \langle 1 \rangle, \quad \langle x(T) \rangle = x_2 \langle 1 \rangle. \quad (7.55)$$

Так как в рассматриваемом случае все потенциалы, действующие на частицу, постоянны в пространстве (поскольку отсутствуют силы), то вторая производная от матричного элемента перехода для пространственной координаты равна нулю в соответствии с уравнением (7.42) и, следовательно, результатом интегрирования будет

$$\langle x(t) \rangle = \left[x_1 + \frac{t}{T} (x_2 - x_1) \right] \langle 1 \rangle. \quad (7.56)$$

Заметим, что выражение в скобках есть как раз величина $x(t)$, взятая вдоль классической траектории $\bar{x}(t)$.

Задача 7.7. Покажите, что для любой квадратичной функции действия

$$\langle x(t) \rangle = \bar{x}(t) \langle 1 \rangle. \quad (7.57)$$

В качестве несколько менее тривиального примера попытаемся вычислить матричный элемент перехода $\langle x(t) x(s) \rangle$ для того же случая свободной частицы, что и выше. Поскольку этот матричный элемент есть уже функция двух моментов времени, можно записать его как $f(t, s)$. Вторая производная по времени в этом случае равна

$$\frac{\partial^2 f(t, s)}{\partial t^2} = \langle \ddot{x}(t) x(s) \rangle. \quad (7.58)$$

Этот матричный элемент можно вычислить с помощью подстановки $F = x(s)$ в уравнение (7.40). В случае $s \neq t$, используя те же соображения, которые приводят к уравнению (7.42), получаем $-(1/m) \langle V'[x(t)] x(s) \rangle$, тогда как при $s = t$, повторив соображения, приводившие нас к соотношению (7.44), найдем, что матричный элемент перехода (7.58) является величиной порядка $1/\varepsilon$. Переходя к пределу при $\varepsilon \rightarrow 0$, имеем

$$m \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \langle m \ddot{x}(t) x(s) \rangle = \frac{\hbar}{i} \delta(t-s) - \langle V'[x(t)] x(s) \rangle. \quad (7.59)$$

Поскольку в рассматриваемом случае свободной частицы потенциал не зависит от пространственных координат, то второй член в правой части выражения (7.59) равен нулю. Получившееся при этом уравнение можно решить, разбив область интересующих нас значений t на две части. В области, где $t < s$,

$$f = a(s)t + b(s), \quad (7.60)$$

а при $t > s$

$$f = A(s)t + B(s). \quad (7.61)$$

Таким образом, в точке $t=s$ первая производная функции f по времени претерпевает скачок, равный $A(s) - a(s)$; в соответствии с уравнением (7.59) $A(s) - a(s) = \hbar/mi$. Кроме того, следствием граничных условий являются равенства

$$\begin{aligned} \langle x(0) x(s) \rangle &= x_1 \langle x(s) \rangle = x_1 \bar{x}(s) \langle 1 \rangle, \\ \langle x(T) x(s) \rangle &= x_2 \bar{x}(s) \langle 1 \rangle. \end{aligned} \quad (7.62)$$

Этого еще недостаточно для определения всех четырех функций a , A , b и B , однако мы можем дополнительно использовать

соотношение

$$\frac{\partial^2 f}{\partial s^2} = \left(\frac{\hbar}{mi} \right) \delta(t-s), \quad (7.63)$$

полученное дифференцированием функции f по переменной s , или учесть, что функция $f(t, s)$ должна быть симметричной относительно переменных t и s . Отсюда следует, что a , A , b и B должны быть линейными функциями переменной s . Теперь граничных условий уже достаточно для определения решения, и мы получаем

$$\langle x(t) x(s) \rangle = \begin{cases} \left[\bar{x}(t) \bar{x}(s) + \frac{\hbar}{miT} s(T-t) \right] \langle 1 \rangle & \text{при } s < t, \\ \left[\bar{x}(t) \bar{x}(s) + \frac{\hbar}{miT} t(T-s) \right] \langle 1 \rangle & \text{при } t < s. \end{cases} \quad (7.64)$$

Легко видеть, что этот результат является правильным. Произведение двух классических траекторий $\bar{x}(t)$ и $\bar{x}(s)$, взятых в разные моменты времени, представляет собой решение, удовлетворяющее необходимым граничным условиям однородных уравнений, которые получаются, если приравнять нулю правые части (7.59) и (7.63). Последние члены в правой части соотношений (7.64) являются частными решениями неоднородных уравнений (7.59) и (7.63), обращающимися в нуль на концах интервала.

Матричный элемент перехода от произведения двух пространственных координат, взятых для двух различных моментов, является не просто выражением для произведения двух соответствующих положений на классической траектории. Он содержит малый добавочный член, который имеет чисто квантовую природу. Этот дополнительный член вполне совместим с нашей картиной квантовомеханического движения. Хотя частица, движущаяся между фиксированными точками на концах интервала, в среднем будет находиться на классической траектории, тем не менее она имеет определенную амплитуду вероятности для движений по каждой из возможных траекторий. Этот факт необходимо помнить, когда рассматривается матричный элемент перехода от произведения пространственных координат, взятых для двух различных моментов. В этом матричном элементе должны быть учтены все возможные положения частицы на альтернативных траекториях; это обстоятельство и дает нам дополнительный член. Альтернативы совпадут лишь в фиксированных точках интервала.

Можно лучше понять смысл этого утверждения, если снова применить нашу классическую аналогию. Предположим, что траектория частицы проходит через некоторую точку с координатой x , абсолютное значение которой велико в момент времени s . Тогда «среднее» значение переменной x для более позднего момента времени t не является уже обычным средним значением траек-

тории $\bar{x}(t)$; в этом случае налицо корреляция с предыдущим большим отклонением. Поэтому «среднее» значение произведения не является просто произведением «средних».

Здесь и в других приложениях классической аналогии нужно помнить, что термин «среднее» относится к величине, определяемой с помощью весовой функции $e^{iS/\hbar}$. Эта экспонента не будет строго положительна, а в общем случае является комплексной величиной. Таким образом, мы получим чисто квантовый результат, подобный соотношению (7.64), где дополнительный корреляционный член является чисто мнимым.

Задача 7.8. Найдите матричный элемент перехода от произведения $x(t)x(s) = f(t, s)$ в случае, когда потенциал не остается постоянным, а соответствует потенциалу сил, действующих на гармонический осциллятор. Получите дифференциальные уравнения для функции f и попытайтесь найти решение

$$\langle f(t, s) \rangle = [\bar{x}(t)\bar{x}(s) + g(t, s)] \langle 1 \rangle. \quad (7.65)$$

Получите уравнение для $g(t, s)$, показав, что g не зависит от значений координат конечных точек x_1 и x_2 и вида силы [производной от потенциала $\gamma(t)$]. Покажите, что вообще при $T = t_2 - t_1$

$$\begin{aligned} g(t, s) &= \frac{\hbar}{m\omega \sin \omega T} \sin \omega s \sin \omega (T - t) \quad \text{при } s < t, \\ g(t, s) &= \frac{\hbar}{m\omega \sin \omega T} \sin \omega t \sin \omega (T - s) \quad \text{при } t < s. \end{aligned} \quad (7.66)$$

§ 4. Общие соотношения для квадратичной функции действия

Если функция действия S имеет квадратичную форму, то очевидно, что матричные элементы перехода для многих функционалов могут быть определены достаточно просто. Стало быть, можно попытаться обобщить наши исследования на некоторые функционалы более общего вида. Методика такого обобщения была уже описана в § 5 гл. 3. Заметим, например, что если действие S квадратично, то матричный элемент перехода функционала можно представить в виде $e^{i/\hbar} \int f(t)x(t)dt$, где $f(t)$ — произвольная функция времени. Его можно выразить интегралом

$$\left\langle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int f(t)x(t)dt \right] \right\rangle = \int_a^b \exp \frac{i}{\hbar} \left[S + \int f(t)x(t)dt \right] \mathcal{D}x(t). \quad (7.67)$$

Если исходное действие S выражено функцией Гаусса, то новое действие

$$S' = S + \int f(t) x(t) dt.$$

Теперь интеграл по траекториям в правой части выражения (7.67) может быть вычислен известными нам методами (§ 5 гл. 3). Обозначив через $S'_{\text{кл}}$ экстремум действия S' , вынесем в (7.67) множитель $\exp(iS'_{\text{кл}}/\hbar)$ за интеграл. Под интегралом остается функция, интегрируемая вдоль траектории $y(t)$ от точки $y(0) = 0$ до точки $y(T) = 0$, т. е. от начала до конца интервала (здесь мы полагаем $x = \bar{x} + y$, где $\bar{x}$ — классическая траектория, соответствующая экстремуму действия).

Интеграл вдоль траектории y не зависит от функции $f(t)$, поскольку она входит в действие S' как коэффициент перед линейным членом $x(t)$. Мы уже видели [см. выражение (3.49)], что в оставшуюся часть такого интеграла входят лишь квадратичные члены функции S' , которые представляют собой не что иное, как квадратичную часть функции S . Поэтому интеграл по траектории в правой части соотношения (7.67) превращается в экспоненту, умноженную на матричный элемент перехода $\langle 1 \rangle$. В результате получаем

$$\left\langle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int f(t) x(t) dt \right] \right\rangle = \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S'_{\text{кл}} - S_{\text{кл}}) \right] \right\} \langle 1 \rangle. \quad (7.68)$$

Мы уже рассматривали экстремум функции $S'_{\text{кл}}$. Отсюда можно получить экстремум функции $S_{\text{кл}}$, если положить $f(t)$ тождественно равной нулю. Заметим, что действие для гармонического осциллятора, определяемое выражением (3.68), является частным случаем функции действия $S'_{\text{кл}}$.

Задача 7.9. Используя полученный выше результат, покажите, что если функция S соответствует гармоническому осциллятору, т. е.

$$S = \frac{m}{2} \int \dot{x}^2 dt - \frac{m\omega^2}{2} \int x^2 dt,$$

то

$$\begin{aligned} \left\langle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int f(t) x(t) dt \right] \right\rangle = & \langle 1 \rangle \left(\exp \left\{ \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega(t_2 - t_1)} \right] \times \right. \right. \\ & \times \left[\frac{2x_2}{m\omega} \int_{t_1}^{t_2} f(t) \sin \omega(t - t_1) dt + \frac{2x_1}{m\omega} \int_{t_1}^{t_2} f(t) \sin \omega(t_2 - t) dt - \right. \\ & \left. \left. - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_1}^t f(t) f(s) \sin \omega(t_2 - t) \sin \omega(t - t_1) ds dt \right] \right\} \right), \end{aligned}$$

где x_1, x_2 — начальные и конечные координаты для осциллятора.

Из матричного элемента перехода, заданного выражением (7.68), можно получить элемент перехода для координаты $x(t)$. Проинтегрируем для этого соотношение (7.68) по $f(t)$:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int f x dt \right] \rangle &= \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta f(t)} \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S'_{\text{кл}} - S_{\text{кл}}) \right] \right\} \langle 1 \rangle = \\ &= \frac{\delta S'_{\text{кл}}}{\delta f(t)} \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S'_{\text{кл}} - S_{\text{кл}}) \right] \right\} \langle 1 \rangle. \end{aligned} \quad (7.69)$$

Полагая в обеих частях этого равенства $f(t) \equiv 0$, получаем

$$\langle x(t) \rangle = \langle 1 \rangle \frac{\delta S'_{\text{кл}}}{\delta f(t)} \Big|_{f \equiv 0}. \quad (7.70)$$

Этот процесс можно продолжить до второй производной:

$$\begin{aligned} \langle x(t) x(s) \rangle &= \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta^2}{\delta f(t) \delta f(s)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S'_{\text{кл}} - S_{\text{кл}}) \right] \Big|_{f \equiv 0} \langle 1 \rangle = \\ &= \langle 1 \rangle \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\delta^2 S'_{\text{кл}}}{\delta f(t) \delta f(s)} + \frac{\delta S'_{\text{кл}}}{\delta f(t)} \frac{\delta S'_{\text{кл}}}{\delta f(s)} \right] \Big|_{f \equiv 0}. \end{aligned} \quad (7.71)$$

Действительно, поскольку функция $S'_{\text{кл}}$ квадратична только по переменной f [ср. выражение (3.66)], то матричный элемент перехода для произведения любого числа координат x' можно выразить непосредственно через производную $\delta S'_{\text{кл}} / \delta f(t)$ и величину $\delta^2 S_{\text{кл}} / \delta f(t) \delta f(s)$, не зависящую от f . Все это, очевидно, следует из соотношений (7.64) и (7.65) и позволяет нам записать матричный элемент перехода для произведения трех координат, что и будет сделано ниже.

Задача 7.10. Покажите, что если

$$\langle x(t) \rangle = \bar{x}(t) \langle 1 \rangle \text{ и } \langle x(t) x(s) \rangle = [\bar{x}(t) \bar{x}(s) + g(t, s)] \langle 1 \rangle,$$

то для любого квадратичного функционала

$$\begin{aligned} \langle x(t) x(s) x(u) \rangle &= \\ &= [\bar{x}(t) \bar{x}(s) \bar{x}(u) + \bar{x}(t) g(s, u) + \bar{x}(s) g(t, u) + \bar{x}(u) g(t, s)] \langle 1 \rangle. \end{aligned}$$

Найдите матричный элемент перехода произведения четырех координат x , допустив, что поскольку $S'_{\text{кл}} - S_{\text{кл}}$ квадратично по переменной f и равно нулю при $f = 0$, то это выражение должно иметь вид

$$S'_{\text{кл}} - S_{\text{кл}} = \frac{1}{2} \int \int f(t) f(s) g(t, s) dt ds + \int \bar{x}(t) f(t) dt,$$

где g и $\bar{x}$ — некоторые функции.

§ 5. Матричные элементы перехода и операторные обозначения

В этом и следующем параграфах покажем, как матричные элементы перехода выражаются в обозначениях, общепринятых для волновых функций и операторов. Это поможет тому читателю, который ранее встречался с другой формой записи, выразить результаты вычислений интегралов по траекториям в более привычном для себя виде.

Если функция F зависит только от переменной x и одного момента времени t [иными словами, если функция F совпадает с функцией $V(x_k)$, взятой в момент времени t_k], то из соотношения (7.10) мы знаем, как в этом случае оценить элемент перехода. Подобным же образом [из выражения (7.15)] можно получить оценку для матричного элемента перехода, если функция F зависит от одной координаты $x(t)$ и двух различных моментов.

Пусть функция F является некоторым импульсом, рассматриваемым в момент времени t_k . Воспользуемся уже известным нам приближением и разобьем ось времени на отрезки длины ε ; тогда

$$F = \frac{m}{\varepsilon} (x_{k+1} - x_k) \quad (7.72)$$

и, следовательно,

$$\left\langle \chi \left| \frac{m}{\varepsilon} (x_{k+1} - x_k) \right| \psi \right\rangle_S = \frac{m}{\varepsilon} (\langle \chi | x_{k+1} | \psi \rangle_S - \langle \chi | x_k | \psi \rangle_S). \quad (7.73)$$

Правую часть выражения (7.73) можно записать в виде

$$\frac{m}{\varepsilon} \left[\int \chi^*(x, t + \varepsilon) x \psi(x, t + \varepsilon) dx - \int \chi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \right]. \quad (7.74)$$

Воспользуемся теперь волновым уравнением. Из задачи 4.3 (гамильтониан H соответствует действию S) следует, что

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H\psi, \quad (7.75)$$

$$\chi^*(x, t + \varepsilon) = \chi^*(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \chi^*}{\partial t} = \chi^* + \frac{i\varepsilon}{\hbar} (H\chi)^*. \quad (7.76)$$

Тогда в первом приближении по ε имеем

$$\begin{aligned} \int \chi^*(x, t + \varepsilon) x \psi(x, t + \varepsilon) dx &= \int \chi^*(x, t) x \psi(x, t) dx - \\ &- \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left\{ \int \chi^*(x, t) x [H\psi(x, t)] dx - \int [H^* \chi^*(x, t)] x \psi(x, t) dx \right\}. \end{aligned} \quad (7.77)$$

С помощью соотношения (4.30) последний интеграл можно записать как $\int \chi^*(x, t) [Hx\psi(x, t)] dx$; упрощая, запишем в оператор-

ном виде

$$\langle \chi | m\dot{x} | \psi \rangle = -\frac{im}{\hbar} \int \chi^* (xH - Hx) \psi dx. \quad (7.78)$$

Это ничем не отличается от соотношения

$$-\frac{i}{\hbar} m \int \chi^* \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \int \chi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx, \quad (7.79)$$

где мы применили результат задачи 4.4. Оператор $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ обычно называется оператором импульса, или, точнее, оператором, представляющим x -компоненту импульса. Структура матричного элемента перехода для величины $m\dot{x}$ соответствует постановке оператора $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ между функциями χ^* и ψ ; аналогично в матричном элементе перехода для величины x мы помещаем x между теми же функциями. Эти соотношения можно понять глубже, если перейти к импульсному представлению. Пусть

$$\chi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(x) e^{-(i/\hbar)px} dx, \quad (7.80)$$

$$\psi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-(i/\hbar)px} dx$$

являются импульсным представлением функций χ и ψ ; тогда можно показать, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(p) p \psi(p) dp. \quad (7.81)$$

Задача 7.11. Докажите соотношение (7.81).

Есть и другой путь к пониманию этого соотношения. Рассмотрим амплитуду вероятности перехода, определяемую выражением

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle = \int \int \chi^*(x_N, t_N) K(x_N, t_N; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1 dx_N. \quad (7.82)$$

Предположим далее, что вся ось x_1 смещена вправо на малый отрезок Δ . Обозначив новую координату x'_1 , имеем

$$x_1 = x'_1 - \Delta. \quad (7.83)$$

Заменив старые переменные x_1 на новые, мы не изменим амплитуду перехода, определяемую соотношением (7.82):

$$\begin{aligned} \langle \chi | 1 | \psi \rangle = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{x'_1}^{x_N} \chi(x_N, t_N) \exp \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{k=2}^{N-1} S[x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k] + \right. \\ & \left. + \left(\frac{i}{\hbar} \right) S[x_2, t_2; x'_1 - \Delta, t] \right\} \psi(x'_1 - \Delta, t) \mathcal{D}x(t) dx'_1 dx_2, \quad (7.84) \end{aligned}$$

где интеграл по траекториям явно выражен при помощи методики, применявшейся ранее в соотношении (2.22).

Разложим теперь функции $S[x_2, t_2; x'_1 - \Delta, t]$ и $\psi(x'_1 - \Delta, t)$ в ряд Тейлора, где сохраним лишь члены первого порядка. Тогда подынтегральная экспонента сведется к выражению

$$\exp \left\{ \sum_{k=2}^{N-1} \left(\frac{i}{\hbar} \right) S[x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k] \right\} \times \\ \times \left\{ 1 - \left(\frac{i}{\hbar} \right) \Delta \frac{\partial}{\partial x'_1} S[x_2, t_2; x'_1, t_1] \right\}. \quad (7.85)$$

В интеграле, определяющем амплитуду перехода, можно опустить штрих, поскольку x'_1 — переменная интегрирования. Тогда соотношение (7.84) примет вид

$$\langle x | 1 | \chi \rangle = \int \int \chi^*(2) K(2, 1) \psi(1) dx_1 dx_2 - \frac{i}{\hbar} \Delta \int \int \chi^*(2) K(2, 1) \times \\ \times \left\{ \psi_1 \frac{\partial}{\partial x_1} S[x_2, t_2; x_1, t_1] + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \psi(x_1, t_1) \right\} dx_1 dx_2, \quad (7.86)$$

где мы предположили, что точка x_2 находится на траектории $x(t)$ и отстоит на интервал ε от точки x_1 , т. е. что $t_2 = t_1 + \varepsilon$.

Первый член в правой части соотношения (7.86) совпадает с амплитудой вероятности перехода в левой части. Это значит, что второй член равен нулю; но он представляет собой комбинацию двух матричных элементов перехода. Поэтому

$$\left\langle \chi \left| -\frac{\partial}{\partial x_1} S[x_2, t_1 + \varepsilon, x_1, t_1] \right| \psi \right\rangle = \left\langle \chi | 1 | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x_1, t_1)}{\partial x_1} \right\rangle. \quad (7.87)$$

В согласии с выражением (2.22) мы применили здесь классическое действие вдоль каждого участка траектории. Поэтому функция $S[2, 1]$, появляющаяся в соотношении (7.87), является классической функцией действия для начала траектории. Ее производная по x_1 (взятая с обратным знаком) равна классическому значению импульса от x_1 . Следовательно, можно написать

$$\langle \chi | p_1 | \psi \rangle = \left\langle \chi | 1 | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right\rangle, \quad (7.88)$$

что совпадает с результатом, полученным в соотношениях (7.78) и (7.79).

В случае усложнения функции действия S , что может произойти, если частично исключить взаимодействие, надо ввести функционал $p(t)$, соответствующий импульсу в момент времени t . В § 4 было дано общее определение этого функционала. Вариация

амплитуды перехода $\langle \chi | 1 | \psi \rangle$ (в первом приближении, когда все координаты, соответствующие предшествующим моментам t , смещены на $-\Delta$) равна произведению этого сдвига Δ на матричный элемент $\langle \chi | p(t) | \psi \rangle$. Отсюда для сколь угодно сложной функции S можно найти функционал от импульса. Аналогично может быть определен гамильтониан (и функционал от энергии), если ввести подобный сдвиг в переменные времени, как это делалось в § 7 гл. 7.

Задача 7.12. Покажите, что если некоторая функция V зависит только от пространственных координат, то

$$\left\langle \chi \left| \frac{dV}{dt} \right| \psi \right\rangle = \left\langle \chi \left| \frac{V(x_{k+1}) - V(x_k)}{\varepsilon} \right| \psi \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* (HV - VH) \psi dx. \quad (7.89)$$

Рассмотрите случай, когда V является также функцией времени. Покажите, что матричный элемент перехода для производной dV/dt совпадает с матричным элементом для оператора $(i/\hbar) \times \times (HV - VH) + \partial V/\partial t$.

Задача 7.13. Покажите, что

$$\langle \chi | m\ddot{x} | \psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* (Hp - pH) \psi dx, \quad (7.90)$$

а также, что для любой величины A (записанной через операторы или любым другим способом) производная dA/dt равна

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (HA - AH).$$

Если рассмотреть выражение для функции F , зависящей от двух последовательных очень близких значений координат:

$$F = \frac{m(x_{k+1} - x_k)}{\varepsilon} x_k, \quad (7.91)$$

то, очевидно, получим

$$\begin{aligned} \langle \chi | F | \psi \rangle &= \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x; t + \varepsilon) m x K(x, t + \varepsilon; \\ &y, t) y \psi(y, t) dy dx - \frac{1}{\varepsilon} \int \chi^*(x, t) m x^2 \psi(x, t) dx, \end{aligned} \quad (7.92)$$

где $t = t_k$. Выше, выводя соотношение (4.12) из (4.2), мы получили

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x, t + \varepsilon; y, t) f(y) dy = f(x) + \frac{i\varepsilon}{\hbar} Hf(x). \quad (7.93)$$

Поэтому первый интеграл в выражении (7.92) равен

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t + \varepsilon) mx \left(1 + \frac{i\varepsilon}{\hbar} H\right) x\psi(x, t) dx. \quad (7.94)$$

Выразив функцию χ^* при помощи соотношения (7.76) и используя эрмитовость гамильтониана H , преобразуем рассматриваемый интеграл к виду

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t) \left(1 - \frac{i\varepsilon H}{\hbar}\right) mx \left(1 + \frac{i\varepsilon}{\hbar} H\right) x\psi(x, t) dx = \\ & = \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t) mx^2\psi(x, t) dx + \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t) m(xH - Hx) x\psi(x, t) dx. \end{aligned} \quad (7.95)$$

Тогда окончательно имеем

$$\begin{aligned} \left\langle \chi \left| m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} x_k \right| \psi \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} \int \chi^*(x, t) m(xH - Hx) x\psi(x, t) dx = \\ &= \int \chi^*(x, t) px\psi(x, t) dx. \end{aligned} \quad (7.96)$$

Для последнего преобразования здесь применялось соотношение (7.78).

Мы рассмотрели пример использования общего правила. В интеграле, который определяет матричный элемент перехода для системы величин, зависящих от последовательных моментов времени, соответствующие операторы размещаются справа налево в том же порядке, как расположены во времени исходные матричные элементы перехода. Если интервал времени конечен и равен Δt , то в элемент перехода надо включить ядро $K = \exp [-(i/\hbar) S \Delta t]$, соответствующее этому отрезку времени (см., например, задачу 7.16). Когда расстояние ε между двумя соседними точками стремится к нулю, ядро K приближается к δ -функции, откуда и следует указанное выше правило.

Задача 7.14. Покажите, что амплитуда вероятности перехода для величины $(m/\varepsilon) (x_{k+1} - x_k) \hat{f}(x_{k+1})$ совпадает с амплитудой для $(\hat{f} \cdot p)$.

Задача 7.15. Покажите, что указанное выше правило выполняется для двух последовательных импульсов, т. е.

$$\begin{aligned} \left\langle \chi \left| m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} m \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right| \psi \right\rangle &= \int \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(y, t) p p \psi(x, t) dx dy = \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(y, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) dx dy. \end{aligned} \quad (7.97)$$

Задача 7.16. Покажите, что

$$\left\langle \chi \left| x_l \frac{m x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right| \psi \right\rangle = \int \chi^*(x, t) x K(x, t; y, s) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(y, s) dy dx, \quad (7.98)$$

если $t_l = t$ и $t_k = s$ при $t_l > t_k$. Что будет, если $t_l < t_k$?

Заметим, что p^2 соответствует произведению pp (произведению двух *последовательных* значений импульса, подобно тому как это было в задаче 7.15), что *не равно* простому квадрату импульса $\langle \chi | m^2 (x_{k+1} - x_k)^2 / \varepsilon^2 | \psi \rangle$, взятого в один определенный момент времени. Последнее выражение при $\varepsilon \rightarrow 0$ неограниченно возрастает как $m\hbar/i\varepsilon$, что очевидно из соотношения (7.49). Разность между выражением $m\hbar/i\varepsilon$ и левой частью уравнения (7.97) в пределе составляет как раз p^2 , т. е.

$$\begin{aligned} \left\langle \chi \left| \frac{m^2 (x_{k+1} - x_k)^2}{\varepsilon^2} \right| \psi \right\rangle &= \frac{m\hbar}{i\varepsilon} \langle \chi | 1 | \psi \rangle + \\ &+ \left\langle \chi \left| m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} m \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right| \psi \right\rangle. \end{aligned} \quad (7.99)$$

Задача 7.17. Докажите это соотношение, применяя формулу (7.40) и полагая

$$F = \frac{m}{\varepsilon} (x_{k+1} - x_k).$$

§ 6. Разложение по возмущениям для векторного потенциала

Сингулярность в матричном элементе перехода для квадрата скорости, выражаемая равенством (7.49), заставляет нас весьма осторожно рассматривать многие соотношения, содержащие скорости. Запишем, например, лагранжиан частицы, находящейся в электромагнитном поле, так:

$$L = \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}|^2 + eV(\mathbf{x}, t) - \frac{e}{c} \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (7.100)$$

Пусть потенциал V равен нулю; мы учтем лишь векторный потенциал A , рассматривая его как малое возмущение. Обозначив

$$S_0 = \frac{m}{2} \int |\dot{\mathbf{r}}|^2 dt, \quad \sigma = -\frac{e}{c} \int \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) dt,$$

запишем разложение в ряд теории возмущений и введем соответствующие матричные элементы перехода:

$$\langle e^{i\sigma/\hbar} \rangle_{S_0} = \langle 1 \rangle_{S_0} + \frac{i}{\hbar} \langle \sigma \rangle_{S_0} - \frac{1}{2\hbar^2} \langle \sigma^2 \rangle_{S_0} + \dots \quad (7.101)$$

Член первого порядка равен величине $-ie/\hbar c$, умноженной на выражение

$$\left\langle \int \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) dt \right\rangle. \quad (7.102)$$

Нам удобнее переписать это в операторных обозначениях. При определении возмущения σ для дискретно заданной траектории (шаг определяется временным интервалом ε) можно было бы записать

$$\sigma = -\frac{e}{c} \sum_k (\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_k, t), \quad (7.103)$$

или же

$$\sigma = -\frac{e}{c} \sum_k (\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1}, t_{k+1}). \quad (7.104)$$

В обоих случаях, переходя к пределу непрерывной траектории, получим отсюда интеграл для σ . Однако если мы будем рассматривать только одну из компонент вектора A (например, A_x), то обнаружим, что компонента $A_x(\mathbf{r}_{k+1}, t_{k+1})$ отличается от $A_x(\mathbf{r}_k, t_k)$ приблизительно на величину

$$(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) \cdot \nabla A_x + \varepsilon \frac{\partial A_x}{\partial t}, \quad (7.105)$$

которая после умножения снова на $\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k$ должна бы быть поправкой второго порядка для каждого значения k , а после суммирования по всем k — поправкой лишь порядка ε . Однако наши траектории не являются непрерывными и матричный элемент перехода для квадрата среднего значения разности $x_{k+1} - x_k$ будет величиной первого порядка малости. Действительно (см. задачу 7.6),

$$(x_{k+1} - x_k)^2 \approx -\frac{\hbar \varepsilon}{mi},$$

$$(x_{k+1} - x_k)(y_{k+1} - y_k) \approx 0,$$

$$(y_{k+1} - y_k)^2 \approx -\frac{\hbar \varepsilon}{mi} \text{ и т. д.}$$

с точностью до членов первого порядка по ε . Следовательно, выражения (7.103) и (7.104) различаются приблизительно на

$$\sum_k \frac{\hbar \varepsilon}{mi} \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_k, t_k) = \frac{\hbar}{mi} \int \nabla \cdot \mathbf{A} dt, \quad (7.106)$$

т. е. на величину нулевого порядка. Отсюда можно заключить, какая же форма выражения для σ будет правильной.

Общий ответ на подобный вопрос излагался в гл. 2, где было сформулировано правило для замены действия S суммой вида $\sum_k S_{\text{кл}}(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k)$, содержащей классическое действие $S_{\text{кл}}$ для перехода между двумя соседними точками. Нет необходимости вычислять действие $S_{\text{кл}}$ точно, для этого достаточно приближения, исключающего описанную выше двузначность. С этой точки зрения выражения (7.103) и (7.104) не вполне удовлетворительны, классическая же функция действия для короткого промежутка времени будет очень близка к

$$S_{\text{кл}}[k+1, k] = \frac{m |\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k|^2}{2\varepsilon} + \frac{1}{2} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1}, t_{k+1}) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_k, t_k)] \cdot (\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k). \quad (7.107)$$

Теперь понятно, что правильное выражение для возмущения σ равно среднему от выражений (7.103) и (7.104) и матричный элемент перехода в (7.99) равен

$$\left\langle \sum_k (\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) \cdot \frac{1}{2} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1}, t_{k+1}) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_k, t_k)] \right\rangle. \quad (7.108)$$

Сумму по k вычислим в дальнейшем как некий интеграл по времени, а пока запишем полученный результат в виде оператора $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p})$ (см. задачу 7.12).

Для электромагнитного потенциала член первого порядка в разложении по возмущениям имеет тот же самый вид, что и член первого порядка в соотношении (6.11), лишь потенциал V заменяется оператором

$$-\frac{e}{2cm} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}).$$

Во втором приближении это уже неверно. Здесь необходимо вычислить

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \left\langle \left[\int \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) dt \right]^2 \right\rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \sum_k \sum_l \left\langle \left\{ [\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k] \times \right. \right. \\ &\times \frac{1}{2} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1}, t_{k+1}) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_k, t_k)] \left. \right\} \left\{ [\mathbf{r}_{l+1} - \mathbf{r}_l] \times \right. \\ &\times \frac{1}{2} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_{l+1}, t_{l+1}) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_l, t_l)] \left. \right\} \left. \right\rangle. \end{aligned} \quad (7.109)$$

Если $k \neq l$, то ничего не меняется и мы получим член второго порядка, который можно было бы найти из сравнения с соотношением (6.13), подставив вместо потенциала V оператор $-e/(2mc)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p})$. Но если $l = k$, то произведение двух скоростей, взятых в последовательные моменты, даст нам новый член. Учитывая выражение (7.49) и результат задачи 7.6, получим дополнительно

$$\frac{e^2}{2c^2} \left\langle + \frac{i\hbar e}{m} \sum_k \left\{ \frac{1}{2} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1}, t_{k+1}) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_k, t_k)] \right\}^2 \right\rangle, \quad (7.110)$$

что эквивалентно интегралу $ie^2/2mc^2 \int [\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)] dt$ и приводит к тому же результату, что и член нулевого порядка функции действия для потенциала $(e^2/2mc^2) \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$.

Таким образом, разложение по возмущениям для действия, зависящего от вектора-потенциала $\mathbf{A}$, имеет тот же вид, что и разложение (6.17), только потенциал V здесь заменен оператором $-e/2mc(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + e^2/2mc^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$. Мы показали это с точностью до членов второго порядка по $\mathbf{A}$; путем небольшого дополнительного рассмотрения можно показать, что все это верно в любом приближении.

Гамильтониан для частицы в поле с вектором-потенциалом $\mathbf{A}$ можно записать в виде

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right). \quad (7.111)$$

Это выражение отличается от аналогичного выражения для свободной частицы [$H_{\text{своб}} = (1/m) \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$] тем, что здесь стоит оператор $-e/2mc(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + e^2/2mc^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$. Такая запись позволяет гораздо проще получить те результаты, которые мы до сих пор выводили непосредственными преобразованиями.

§ 7. Гамильтониан

Используя полученные выше результаты, легко написать амплитуду перехода для гамильтониана, сложив амплитуду перехода для квадрата импульса, деленную на $2m$, и амплитуду перехода для потенциала. Таким образом, для момента времени t_k гамильтониан может быть записан как

$$H_k = \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) + V(x_k). \quad (7.112)$$

В то же время операторная форма матричного элемента перехода для этого гамильтониана будет иметь вид

$$\langle \chi | H_k | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* \left[\frac{p^2}{2m} + V(x) \right] \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* H \psi dx. \quad (7.113)$$

Хотя такой метод определения амплитуды перехода для гамильтониана дает совершенно правильный результат, он тем не менее представляется несколько искусственным, поскольку здесь нигде не выражена зависимость гамильтониана от времени. Поэтому далее мы рассмотрим другое определение матричных элементов перехода, в основе которого лежит исследование изменения состояний при небольших вариациях времени. Такой подход даст нам возможность определять величину H_k , исходя только из вида функции S (не касаясь того, насколько это будет сложно).

Чтобы сделать это, разобьем ось времени на бесконечно малые отрезки, подобно тому как мы поступали при определении интегралов по траекториям. Однако теперь важно отметить, что деление оси на равные отрезки не является обязательным. Здесь подходит любое разбиение точками t_i , важно лишь, чтобы в пределе (независимо от величины элементов разбиения) все отрезки $t_{i+1} - t_i$ стремились к нулю. Предположим для простоты, что наша система состоит из одной частицы, совершающей одномерное движение. В этом случае действие запишется в виде суммы

$$S = \sum_i S[x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i], \quad (7.114)$$

где

$$S[x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i] = \int_{t_i}^{t_{i+1}} L[\dot{x}(t), x(t)] dt. \quad (7.115)$$

Интеграл в этом выражении взят вдоль некоторой классической траектории между точками $x_i = x(t_i)$ и $x_{i+1} = x(t_{i+1})$. Следовательно, в случае нашего одномерного примера можно с достаточной точностью записать

$$S[x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i] = \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i} \right)^2 - V(x_{i+1}) \right] (t_{i+1} - t_i). \quad (7.116)$$

Константа нормировки для интеграла по dx_i в момент времени t_i будет такой же, как и ранее, а именно

$$A = \left[\frac{2\pi\hbar i (t_{i+1} - t_i)}{m} \right]^{1/2}. \quad (7.117)$$

Выясним теперь связь гамильтониана H с изменением состояния при небольшой вариации времени. Рассмотрим для этого состоя-

ние $\psi(t)$, определенное в пространственно-временной области R . Представим себе, что в тот же самый момент времени t мы рассматриваем другое состояние $\psi_\delta(t)$, определенное в области R_δ . Пусть область R_δ пространственно совпадает с R , но относится к более раннему моменту времени, сдвинутому в прошлое на интервал δ . Все устройства, необходимые для локализации системы в области R_δ , совершенно тождественны тем, которые локализуют систему в области R , но начинают действовать на интервал времени $\Delta t = \delta$ раньше. Если лагранжиан L явно зависит от времени, то на нем также скажется этот сдвиг, т. е. состояние ψ_δ , соответствующее L_δ , будет таким же, как и состояние ψ , с той лишь разницей, что при написании L_δ мы пользуемся в качестве времени переменной $t + \delta$.

Зададим теперь вопрос: чем состояние ψ_δ отличается от состояния ψ ? При любых измерениях вероятность пребывания системы в любой конкретной области R' зависит от того, какая из двух областей (R или R_δ) была принята за исходную. Определим изменение амплитуды перехода $\langle \chi | 1 | \psi_\delta \rangle$, вызываемое сдвигом во времени. Этот сдвиг можно рассматривать как смещение, которое происходит благодаря уменьшению всех значений t_i , у которых $i \leq k$, на величину δ ; если же $i > k$, то все t_i сохраняются.

Читателю, который заглянет несколько вперед, может показаться, что мы намеренно создаем для себя трудности. Ясно, что все наши усилия в конце концов должны свестись к тому, чтобы перейти к пределу, устремив к нулю все отрезки нашего разбиения оси времени. Однако здесь следует указать наконец, что, во всяком случае, один из интервалов $t_{k+1} - t_k$ имеет нижнюю границу и не может быть бесконечно уменьшаем. Эту трудность удастся обойти, если предположить, что временной сдвиг δ сам должен быть функцией времени. Можно представить себе, что эта величина монотонно возрастает до момента $t = t_k$, а потом монотонно убывает. Тогда, полагая вариацию δ равномерной, можно монотонно устремить к нулю все интервалы времени, включая и $t_{k+1} - t_k$. Затем рассмотрим эффект первого порядка, перейдя к пределу при $\delta \rightarrow 0$. Результат, полученный этим более строгим способом, оказывается в сущности тем же, что и в предыдущем примере.

Возвращаясь теперь к нашему рассмотрению эффекта, вызванного сдвигом времени, мы видим, что определенная соотношением (7.115) функция действия $S[x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i]$ сохраняется до тех пор, пока моменты t_{i+1} и t_i изменяются на одну и ту же величину. С другой стороны, функция $S[x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k]$ переходит в $S[x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k - \delta]$. Более того, константа нормировки в интеграле по dx_k также изменится и будет иметь вид

$$A_k = \left[\frac{2\pi\hbar i (t_{k+1} - t_k + \delta)}{m} \right]^{1/2}. \quad (7.118)$$

Для определения амплитуды вероятности перехода применим соотношение (7.2). Вспоминая, что интеграл по траекториям зависит как от функции действия S , так и от константы нормировки A (обе эти величины изменяются при нашем сдвиге времени), можно изменение амплитуды перехода с точностью до первого порядка по δ записать в виде

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle - \langle \psi | 1 | \psi_0 \rangle = \left\langle \chi \left| \frac{\partial S [x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k]}{\partial t_k} + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} \right| \psi \right\rangle \frac{i\delta}{\hbar}. \quad (7.119)$$

Второй член в этом выражении соответствует изменению константы A . Функционал, отвечающий гамильтониану квантовой механики, определим как

$$H_k = \frac{\partial S [x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k]}{\partial t_k} + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)}. \quad (7.120)$$

Первый член в правой части последнего выражения совпадает с определением классического гамильтониана. Второй член необходим для того, чтобы в квантовомеханическом случае величина H_k оставалась конечной при стремлении интервала $t_{k+1} - t_k$ к нулю. Этот член получается вследствие изменения константы нормировки A , обусловленного сдвигом времени δ .

Применяя полученный результат к частному случаю одномерного движения [см. выражение (7.116)], можно записать

$$\begin{aligned} H_k &= \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{t_{k+1} - t_k} \right)^2 + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} + V(x_{k+1}) = \\ &= \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{t_{k+1} - t_k} \right) \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{t_k - t_{k-1}} \right) + V(x_k). \end{aligned} \quad (7.121)$$

Второе из этих соотношений получено с учетом равенства (7.54). Записав произведение скоростей в виде произведения их значений, относящихся к последовательным моментам, мы можем устранить член $\hbar/[2i(t_{k+1} - t_k)]$.

Полагая теперь, что $t_\delta = t - \delta$ для всех $t < t_k$, получаем соотношение

$$\psi(t) = \psi(t_\delta) + \delta \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi_\delta + \delta \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (7.122)$$

связывающее между собой значения функции ψ , определенные в областях R и R_δ . Таким образом, последовательность соотношений между операторами, уравнением Шредингера и интегралами по траекториям может быть получена как комбинация выражений (7.119), (7.120) и (7.122):

$$\delta \left\langle \chi | 1 | \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{\hbar} \delta \langle \chi | H_k | \psi \rangle, \quad (7.123)$$

что снова приводит нас к уравнению Шредингера

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi. \quad (7.124)$$

Для любых сколь угодно сложных функций действия можно найти выражение гамильтониана (т. е. функционал, соответствующий энергии), если рассмотреть изменения матричных элементов перехода $\langle \chi | 1 | \psi \rangle$ с точностью до величин первого порядка по δ , когда все моменты, предшествующие моменту t , сдвинуты на величину $\Delta t = -\delta$, и записать эти изменения как $\delta \langle \chi | H(t) | \psi \rangle$.

ГАРМОНИЧЕСКИЕ ОСЦИЛЛЯТОРЫ

Задача о гармоническом осцилляторе — это, вероятно, простейшая задача в квантовой механике. Мы вполне можем решить ее, заметив, что ядро, описывающее движение гармонического осциллятора (см. задачу 3.8), равно

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} [(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b] \right\}. \quad (8.1)$$

Однако для полного рассмотрения этой задачи нам необходимо решить — точно или приближенно — все задачи, в которые так или иначе входят гармонические осцилляторы. В этой главе будет разобран ряд таких задач как об отдельных осцилляторах, так и о системах взаимодействующих гармонических осцилляторов. Можно было бы довести эту программу до конца, рассмотрев практически все виды классических задач на колебания: задачи о колебании пластинок, стержней и т. д., но таких систем слишком много, и мы рискуем потратить все наше время, так и не коснувшись квантовомеханических проблем. Поэтому займемся рассмотрением лишь систем атомных размеров: например, проанализируем колебания молекулы CO_2 . Тут мы обнаружим, в частности, что потенциальная энергия взаимодействия между атомами углерода и кислорода не описывается квадратичной функцией. И все же для более низких энергетических состояний потенциал так близок к квадратичному, что рассмотрение, проведенное на основе модели гармонического осциллятора, послужит хорошим приближением для решения многих задач.

В многоатомной молекуле, которая во много раз сложнее одноатомной, энергия возбуждения будет уже не так велика, а перемещения атомов малы по сравнению с размерами самих молекул. В этом случае снова можно считать, что потенциальная энергия очень близка к квадратичной функции координат. Поэтому такая система будет приблизительно соответствовать набору связанных гармонических осцилляторов. Кристалл твердого тела можно, с одной стороны, рассматривать как многоатомную молекулу очень больших размеров; с другой стороны, его можно

рассматривать так же, как некую совокупность взаимодействующих друг с другом гармонических осцилляторов.

В качестве еще одного примера рассмотрим электромагнитное поле в ограниченном объеме. С классической точки зрения его можно представлять себе как набор стоячих волн, которые образуются при колебаниях поля с определенными частотами. В квантовой механике каждая из таких волн задает квантовый осциллятор.

§ 1. Простой гармонический осциллятор

Решение уравнения Шредингера. В этом параграфе мы получим ряд соотношений, описывающих простой одномерный гармонический осциллятор. Начнем наше рассмотрение с уравнения Шредингера. В задаче 2.2 мы получили лагранжиан одномерного гармонического осциллятора в виде

$$L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2). \quad (8.2)$$

Соответствующий гамильтониан, который используется в дальнейшем рассмотрении, запишется как

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2, \quad (8.3)$$

и можно написать волновое уравнение

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) \psi. \quad (8.4)$$

Поскольку гамильтониан не зависит от времени, то переменные в волновом уравнении легко разделяются и мы получаем решение в виде стоячих волн для состояний с определенными энергиями E_n . Часть решения, зависящая от времени, будет пропорциональна $\exp(iE_n t/\hbar)$.

Вспомнив, что оператор импульса p соответствует дифференцированию по x (см. § 5 гл. 7), представим уравнение Шредингера для пространственной части волновой функции в виде

$$H\varphi_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \varphi_n = E_n \varphi_n. \quad (8.5)$$

Это уравнение легко решить; результат такого решения приводится во многих книгах по квантовой механике (например, [2]). Собственные значения энергии здесь равны

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (8.6)$$

где n принимает целые значения 0, 1, 2, Собственные функции φ_n имеют вид

$$\varphi_n = (2^n n!) \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} H_n \left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) e^{-(m\omega x^2/2\hbar)}, \quad (8.7)$$

где H_n — полиномы Эрмита

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, \\ H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, \\ &\dots \dots \dots \\ H_n(y) &= (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Эти полиномы легче всего вычисляются с помощью производящей функции

$$e^{-t^2+2ty} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(y) \frac{t^n}{n!}. \quad (8.9)$$

Все эти результаты можно было бы получить и другим путем. Так, например, функции φ_n мы нашли при решении дифференциального уравнения в частном случае, когда гамильтониан не зависит от времени. Однако нам уже известно решение и для случая с временной зависимостью; отсюда можно получить и эти функции непосредственным образом. Было бы весьма поучительно провести такой вывод, с тем чтобы проиллюстрировать некоторые из формул, выведенных в предыдущих главах.

Решение, полученное из рассмотрения ядра. В задаче 3.8 мы получили ядро, описывающее движение осциллятора; с другой стороны, из уравнения (4.59) известно, что это ядро может быть разложено в ряд по экспонентам, зависящим от времени и умноженным на произведения собственных функций от энергии, т. е.

$$\begin{aligned} &\left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \right) [(x_1^2 + x_2^2) \cos \omega T - 2x_1 x_2] = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(i/\hbar)E_n T} \varphi_n(x_2) \varphi_n^*(x_1). \end{aligned} \quad (8.10)$$

Используя соотношения

$$\begin{aligned} i \sin \omega T &= \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1 - e^{-2i\omega T}), \\ \cos \omega T &= \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1 + e^{-2i\omega T}), \end{aligned} \quad (8.11)$$

левую часть равенства (8.10) можно записать как

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(i\omega T/2)} (1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left[(x_1^2 + x_2^2) \left(\frac{1 + e^{2i\omega T}}{1 - e^{2i\omega T}} \right) - \frac{4x_1x_2e^{-i\omega T}}{1 - e^{2i\omega T}} \right] \right\}. \quad (8.12)$$

Ряд, имеющий вид правой части равенства (8.10), получится, если разложить выражение (8.12) в ряд по степеням функции $\exp(-i\omega T)$. Так как первый коэффициент здесь равен $\exp(-i\omega T/2)$, то все члены этого разложения будут иметь вид $\exp(-i\omega T/2) \exp(-in\omega T)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$, а это означает, что уровни энергии определяются выражением

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (8.13)$$

Однако для того, чтобы найти волновые функции, необходимо выполнить разложение полностью. Проиллюстрируем этот метод решения на примере $n = 2$. Разлагая левую часть равенства (8.10) до членов указанного порядка, получаем

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} \left(1 + \frac{1}{2} e^{-2i\omega T} + \dots \right) \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (x_1^2 + x_2^2) - \right. \\ \left. - \frac{m\omega}{\hbar} (x_1^2 + x_2^2) (e^{-2i\omega T} + \dots) + \frac{2m\omega}{\hbar} x_1x_2e^{-i\omega T} + \dots \right] \quad (8.14)$$

или

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1^2+x_2^2)} e^{-i\omega T/2} \left(1 + \frac{1}{2} e^{-2i\omega T} \right) \times \\ \times \left[1 + \frac{2m\omega}{\hbar} x_1x_2e^{-i\omega T} + \frac{4m^2\omega^2}{2\hbar^2} x_1^2x_2^2e^{-2i\omega T} - \right. \\ \left. - \frac{m\omega}{\hbar} (x_1^2 + x_2^2) e^{-2i\omega T} \dots \right]. \quad (8.15)$$

Теперь мы можем выделить коэффициент при члене низшего порядка. Он равен

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1^2+x_2^2)} e^{-(i\omega T/2)} = e^{-(i/\hbar)E_0T} \varphi_0(x_2) \varphi_0^*(x_1). \quad (8.16)$$

Это означает, что $E_0 = \hbar\omega/2$ и

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(m\omega x^2/2\hbar)}. \quad (8.17)$$

Мы выбрали в качестве φ_0 действительную функцию. Можно было бы выбрать и комплексную функцию, включив множитель $e^{i\delta}$ (где δ константа), однако это не даст ничего нового для физической интерпретации результата.

Член следующего порядка в разложении равен

$$e^{-i\omega T/2} e^{-i\omega T} \frac{m\omega}{\pi\hbar} e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1^2+x_2^2)} \frac{2m\omega}{\hbar} x_1 x_2 = e^{-(i/\hbar)E_1 T} \varphi_1(x_2) \varphi_1^*(x_1). \quad (8.18)$$

Отсюда следует, что $E_1 = 3/2 \hbar \omega$ и

$$\varphi_1(x) = \frac{2m\omega}{\hbar} x \varphi_0(x). \quad (8.19)$$

Следующий член соответствует энергии $E_2 = 5/2 \omega \hbar$. Его часть, зависящая от x_1 и x_2 , равна

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)\right] \left[\frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2} x_1^2 x_2^2 - \frac{m\omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)\right]; \quad (8.20)$$

это не что иное, как произведение функций $\varphi_2(x_2) \varphi_2^*(x_1)$. Так как выражение в скобках может быть переписано как

$$\frac{1}{2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x_1^2 - 1\right) \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x_2^2 - 1\right), \quad (8.21)$$

то мы получим функцию φ_2 в виде

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) \varphi_0(x). \quad (8.22)$$

Результаты эти можно сравнить с результатами в соотношениях (8.7) и (8.8), полученными из решения волнового уравнения.

В принципе таким способом можно найти все волновые функции. Однако здесь мы встречаемся с трудной алгебраической задачей отыскания общего вида функций φ_n непосредственно из разложения. Другой путь, обходящий эту трудность, показан в следующей задаче.

Задача 8.1. Заметим, что амплитуда перехода из любого состояния $f(x)$ в другое состояние $g(x)$ равна амплитуде перехода $\langle g | 1 | f \rangle$, как это определено в соотношении (7.1).

Пусть $f(x)$ и $g(x)$ могут быть разложены в ряд по ортогональным функциям $\varphi_n(x)$ — решениям волнового уравнения, связанного с ядром $K(2, 1)$, подобно тому как это делалось в § 2 гл. 4. Таким образом,

$$f(x) = \sum f_n \varphi_n(x), \quad g(x) = \sum g_n \varphi_n(x). \quad (8.23)$$

Используя коэффициенты f_n и g_n и соотношение (4.59), покажите, что амплитуду перехода можно представить в виде

$$\iint g^*(x_2) K(x_2, T; x_1, 0) f(x_1) dx_1 dx_2 = \sum g_n^* f_n e^{-(i/\hbar)E_n T}. \quad (8.24)$$

Пусть теперь мы выбрали две такие функции f и g , что для них разложение в правой части соотношения (8.24) является достаточно простым. Тогда после вычисления функций f_n можно получить некоторое представление о волновых функциях φ_n из вида разложений (8.23). Предположим, что функции f и g мы выбрали следующим образом:

$$f(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\right], \quad (8.25)$$

$$g(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-b)^2\right]. \quad (8.26)$$

Эти функции представляют собой гауссовы распределения с центрами соответственно в точках a и b . Обозначим их как $f_n = f_n(a)$ и $g_n = f_n(b)$. Определим амплитуду перехода $\langle f|1|g\rangle$, где f и g заданы соответственно выражениями (8.25) и (8.26), а ядро совпадает с ядром для случая гармонического осциллятора из выражения (8.1). Интеграл в формуле (8.24) преобразуем так, чтобы получить

$$\begin{aligned} \exp\left[-\frac{i\omega T}{2} - \frac{m\omega}{4\hbar}(a^2 + b^2 - 2abe^{-i\omega T})\right] = \\ = \sum_n f_n(a) f_n^*(b) e^{-(i/\hbar)E_n T}. \end{aligned} \quad (8.27)$$

Исходя из этого результата, покажите, что $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ и

$$f_n(a) = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2} \frac{a^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-\frac{m\omega a^2}{4\hbar}\right). \quad (8.28)$$

Подставляя полученный результат в формулу (8.24), напишите для φ_n выражение, которое следует из соотношения (8.7), в предположении, что функции $H_n(x)$ нам неизвестны. Найдите для них отсюда производящую функцию (8.9).

§ 2. Многоатомная молекула

В предыдущем параграфе мы получили волновые функции и энергетические уровни, описывающие простой гармонический осциллятор. Исследование системы взаимодействующих осцилляторов начнем с изучения вопроса о многоатомных молекулах. Определим сначала координаты, описывающие положение атомов в молекуле. Положение каждого атома будем задавать тремя ортогональными координатами: x_a , y_a и z_a , которые отсчитываются от его положения равновесия. Если масса атома равна m_a , то кинетическая энергия всей молекулы определяется выражением

$$\sum_a \frac{1}{2} m_a (\dot{x}_a^2 + \dot{y}_a^2 + \dot{z}_a^2), \quad (8.29)$$

где суммирование производится по всем атомам, входящим в молекулы.

При общем рассмотрении нам удобнее не пользоваться векторными обозначениями, а применить другой метод. Предположим, что молекула содержит N атомов. Тогда $n = 3N$ ортогональных координат можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned} q_1 &= \sqrt{m_a} x_a, & q_2 &= \sqrt{m_a} y_a, & q_3 &= \sqrt{m_a} z_a, \\ q_4 &= \sqrt{m_b} x_b, & q_5 &= \sqrt{m_b} y_b \dots \end{aligned} \quad (8.30)$$

С помощью этих новых координат кинетическая энергия запишется как

$$\text{кинетическая энергия} = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} \dot{q}_j^2. \quad (8.31)$$

Потенциальная энергия $V(q_1, q_2, \dots)$ является функцией всех смещений q_j . Разложим функцию V в ряд Тейлора около положения равновесия $q_j = 0$:

$$\begin{aligned} V(q_1, q_2, \dots, q_n) &= V(0, 0, \dots, 0) + \sum_{j=1}^n q_j V_j(0, 0, \dots, 0) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n q_j q_k V_{jk}(0, 0, \dots, 0) + \dots, \end{aligned} \quad (8.32)$$

где

$$V_j = \frac{\partial V}{\partial q_j}, \quad V_{jk} = \frac{\partial^2 V}{\partial q_j \partial q_k}. \quad (8.33)$$

Первый член здесь выражает потенциальную энергию в положении равновесия; эта величина не зависит от q . Можно положить ее равной нулю и отсчитывать все другие значения потенциальной энергии в соответствии с этим соглашением. Таким образом, первый член в разложении может быть отброшен. Коэффициент $V_j(0, 0, \dots, 0)$ появляется также и в следующем члене, который соответствует градиенту потенциала или силе, связанной со смещением q_j и отнесенной к точке равновесия. Этот коэффициент, следовательно, равен нулю, и соответствующий член разложения тоже может быть опущен. Другими словами, поскольку точка равновесия соответствует минимуму потенциальной энергии, можно отбросить члены первого порядка, связанные со смещениями по отношению к этой точке.

Коэффициенты $V_{jk}(0, 0, \dots, 0)$, которые появляются в следующем члене, включают в себя систему постоянных, зависящих от структуры молекулы. Обозначим эти постоянные через v_{jk} .

Теперь допустим, что мы пренебрегаем всеми членами более высоких порядков, т. е. будем приближенно считать, что потенциальная энергия содержит лишь квадратичную зависимость от координат. Даже в тех случаях, когда потенциал не является квадратичной функцией координат, наше приближение должно быть достаточно хорошим при малых смещениях; это означает, что в нашем приближении мы представляем рассматриваемую молекулу как систему гармонических осцилляторов.

Комбинируя соотношения (8.31) и (8.32), можно записать лагранжиан в виде

$$L = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \dot{q}_j^2 - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n q_j q_k v_{jk}. \quad (8.34)$$

Подставим этот лагранжиан в интеграл по траекториям, который определяет ядро, описывающее движение атомов в молекуле:

$$K = \int \int \dots \int \left(\exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \left[\int \sum_{j=1}^n \dot{q}_j^2(t) dt - \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n v_{jk} \int q_j(t) q_k(t) dt \right] \right\} \right) \mathcal{D}q_1(t) \mathcal{D}q_2(t) \dots \mathcal{D}q_n(t). \quad (8.35)$$

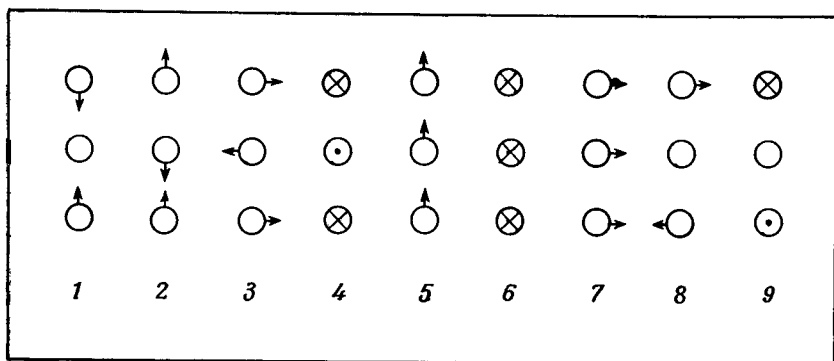
Все интегралы по траекториям являются здесь гауссовыми и, следовательно, могут быть вычислены методами, рассмотренными в § 5 гл. 3. Чтобы выполнить эти расчеты, нам нужно найти траектории $q_j(t)$, для которых действие S имеет экстремум. Вариация по всем значениям координат q_j дает нам эти траектории как решения уравнений

$$\ddot{q}_j = - \sum_{k=1}^n v_{jk} q_k. \quad (8.36)$$

Из этих уравнений следует, что сила, действующая на атом по какому-то конкретному направлению, определяется линейной комбинацией смещений всех атомов.

Такие системы взаимодействующих осцилляторов ранее детально рассматривались с классической точки зрения. Поскольку во многих задачах квантовой механики при вычислении ядер мы используем классическую функцию действия в качестве первого приближения, для дальнейшего рассмотрения полезно взять все возможное из классической модели. Один из важных результатов классического анализа заключается в следующем: деформации молекул, таким образом, будут синусоидально изменяться. Характер искажений в этом случае остается неизменным. При некоторых способах деформации молекулы могут возникать соб-

ственные колебания простого синусоидального типа. Различные виды таких деформаций будут, вообще говоря, вызывать осцилляции с различными частотами; каждое такое собственное колебание определенной частоты мы назовем *модой*¹⁾. Некоторые из них будут иметь нулевую частоту, а для отдельных групп мод частоты могут совпадать. Отметим важный факт: всякое малое изменение положений атомов молекулы можно выразить линейной комбинацией подобных мод.



Фиг. 8.1. Нормальные моды молекулы CO_2 .

Знак $\odot$ означает движение из плоскости рисунка, знак $\otimes$ означает движение за плоскость; моды от первой до четвертой периодические, моды с пятой по седьмую — сдвиг всей системы; моды восемь и девять — вращение.

Если в молекуле имеется N атомов, то она обладает $n = 3N$ различными модами движения. Таким образом, например, молекула CO_2 имеет девять мод, как это показано на фиг. 8.1, где движение каждого атома указано стрелкой. В этом случае только первая и четвертая моды являются периодическими (т. е. имеют отличную от нуля частоту). На рисунке указано направление движения в первую половину цикла; во вторую половину цикла все стрелки будут обращены в противоположную сторону.

Получим теперь математическое описание мод. Конечно, это рассмотрение относится более к классической физике, нежели к квантовой механике.

Рассмотрим некоторую частную моду частот ω . В этом случае по всем координатам q_j происходят колебания с одинаковой

¹⁾ Термин «мода» (mode), как синоним собственного нормального колебания некоторой связанной системы с большим числом степеней свободы, часто встречается в зарубежной физической литературе, а последнее время проникает и в издания на русском языке. Будучи несколько жаргонным, он вместе с тем обладает преимуществом краткости. Поскольку авторы настоящей книги широко пользуются этим термином, он сохранен и в переводе.—
Прим. ред.

частотой. Можно выбрать такую систему начальных смещений a_j (свою для каждой моды), что при нулевых начальных скоростях изменение любой координаты со временем может быть записано в виде

$$q_j = a_j \cos \omega t. \quad (8.37)$$

Подставив это соотношение в уравнение (8.36), получим

$$\omega^2 a_j = \sum_{k=1}^n v_{jk} a_k. \quad (8.38)$$

Это система из n уравнений для n неизвестных действительных величин a_j . Поскольку эта система однородна, она имеет решение только тогда, когда детерминант из коэффициентов системы равен нулю. Следовательно, необходимо потребовать

$$\begin{bmatrix} (\omega^2 - v_{11}) & -v_{12} & \dots & -v_{1n} \\ -v_{21} & (\omega^2 - v_{22}) & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -v_{n1} & \dots & \dots & (\omega^2 - v_{nn}) \end{bmatrix} = 0. \quad (8.39)$$

Это уравнение имеет n решений для ω^2 . Для каждого решения, например для ω_α^2 , можно найти значения a_j из системы уравнений (8.38); обозначим их как $a_{j\alpha}$. В силу однородности системы ее решения определяются лишь с точностью до произвольного общего множителя. Выберем этот множитель так, чтобы

$$\sum_{j=1}^n a_{j\alpha}^2 = 1. \quad (8.40)$$

Очевидно, этот процесс можно повторить для всех n мод, т. е. для $\alpha = 1, 2, \dots, n$. Таким образом определим n величин ω_α^2 и для каждого значения α получим n констант $a_{j\alpha}$. Любое возможное движение атомов системы представляется линейной комбинацией этих мод. Следовательно, величину смещения в общем случае можно записать как

$$q_j = \sum_{\alpha=1}^n C_\alpha a_{j\alpha} \cos(\omega_\alpha t + \delta_\alpha). \quad (8.41)$$

Постоянная амплитуда C_α и постоянная фаза δ_α зависят здесь от начальных условий. То, что выражение (8.41) действительно описывает движение в нашей системе, легко проверить, подставив его в уравнение (8.36).

Удобно ввести в выражение (8.41) комплексные обозначения:

$$q_j = \sum_{\alpha=1}^n C_\alpha a_{j\alpha} e^{i\omega_\alpha t} e^{i\delta_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^n c_{\alpha j} a_{j\alpha} e^{i\omega_\alpha t}. \quad (8.42)$$

Физический смысл имеет только действительная часть этого выражения. Комплексные постоянные c_α зависят от начальных условий и могут быть определены, например, так: если начальные смещения и скорости равны соответственно $q_j(0)$ и $\dot{q}_j(0)$, то

$$\begin{aligned} q_j(0) &= \operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^n c_\alpha a_{j\alpha} = \sum_{\alpha=1}^n (\operatorname{Re} c_\alpha) a_{j\alpha}, \\ \dot{q}_j(0) &= \operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^n i c_\alpha a_{j\alpha} \omega_\alpha = \sum_{\alpha=1}^n [-(\operatorname{Im} c_\alpha) \omega_\alpha a_{j\alpha}]. \end{aligned} \quad (8.43)$$

Поскольку все константы $a_{j\alpha}$ являются действительными величинами, эти пары уравнений определяют как действительную, так и мнимую части c_α .

Систему уравнений (8.43) очень просто решить, если использовать одно важное свойство, вытекающее из (8.48), которое мы сейчас и докажем. При любом значении α постоянные $a_{j\alpha}$ удовлетворяют соотношению

$$\omega_\alpha^2 a_{j\alpha} = \sum_{k=1}^n v_{jk} a_{k\alpha}. \quad (8.44)$$

Если это соотношение умножить на $a_{j\beta}$ и просуммировать по всем значениям j , то получим

$$\omega_\alpha^2 \sum_{j=1}^n a_{j\alpha} a_{j\beta} = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n v_{jk} a_{k\alpha} a_{j\beta}. \quad (8.45)$$

Поскольку коэффициенты v_{jk} симметричны, левая часть уравнения (8.45) не изменится, если индексы α и β поменять местами. Это означает, что

$$(\omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2) \sum_{j=1}^n a_{j\alpha} a_{j\beta} = 0. \quad (8.46)$$

Таким образом, если частоты ω_α и ω_β различны, то должно выполняться равенство

$$\sum_{j=1}^n a_{j\alpha} a_{j\beta} = 0. \quad (8.47)$$

Если же две частоты в (8.46) совпадают, то константы $a_{j\alpha}$ остаются неопределенными, однако в этом случае мы получаем свободу выбора и вправе сделать так, чтобы уравнение (8.47) удовлетворялось для $\alpha \neq \beta$. Таким образом, используя нормировку (8.40), можно записать

$$\sum_{j=1}^n a_{j\alpha} a_{j\beta} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (8.48)$$

где $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера.

Теперь легко найти действительную часть c_α из уравнений (8.43). Умножим первое из них на $a_{j\beta}$ и просуммируем по всем значениям α ; тогда вся правая часть исчезает, за исключением члена с $\alpha = \beta$, который дает

$$\operatorname{Re} c_\beta = \sum_{j=1}^n a_{j\beta} q_j(0). \quad (8.49)$$

Подобным же образом можно показать, что

$$\operatorname{Im} c_\beta = \frac{1}{\omega_\beta} \sum_{j=1}^n a_{j\beta} \dot{q}_j(0). \quad (8.50)$$

Так может быть составлено полное описание любого произвольного движения в молекуле, если нам известны нормальные моды системы и начальные условия этого движения.

§ 3. Нормальные координаты

Можно исследовать движения в системе и другим способом, отличным от рассмотренного. Выберем новую совокупность координат $Q_\alpha(t)$, которые будут некоторой линейной комбинацией старых координат:

$$Q_\alpha(t) = \sum_{j=1}^n a_{j\alpha} q_j(t), \quad (8.51)$$

и наоборот, старые координаты можно выразить через новые:

$$q_j(t) = \sum_{\alpha=1}^n a_{j\alpha} Q_\alpha(t). \quad (8.52)$$

С учетом равенства (8.48) можно записать кинетическую энергию системы как

$$\text{кинетическая энергия} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \dot{q}_j^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n a_{j\alpha} a_{j\beta} \dot{Q}_\alpha \dot{Q}_\beta = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \dot{Q}_\alpha^2. \quad (8.53)$$

Потенциальная энергия системы

$$V = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n v_{jk} q_j q_k = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n v_{jk} a_{j\alpha} a_{k\beta} Q_\alpha Q_\beta. \quad (8.54)$$

Из уравнения (8.38) имеем

$$\sum_{k=1}^n v_{jk} a_{k\beta} = \omega_\beta^2 a_{j\beta}; \quad (8.55)$$

это означает, что если учесть равенство (8.48), потенциальная энергия может быть записана как

$$V = \frac{1}{2} \omega_\beta^2 Q_\beta Q_\alpha = \sum_{j=1}^n a_{j\alpha} a_{j\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2. \quad (8.56)$$

Лагранжиан (8.34) тоже можно выразить через новые переменные:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n (\dot{Q}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2). \quad (8.57)$$

Представленный в такой форме лагранжиан описывает систему гармонических осцилляторов, которые уже не взаимодействуют. Это означает, что переменные в последнем выражении разделяются. Каждый осциллятор характеризуется единичной массой и некоторой собственной частотой ω_α : уравнение движения для него можно записать в виде

$$\ddot{Q}_\alpha = -\omega_\alpha^2 Q_\alpha. \quad (8.58)$$

Отсюда ясно, что каждая мода осциллирует свободно со своей собственной частотой ω_α независимо от любой другой моды. Сравнивая соотношения (8.49) и (8.50) с выражением (8.51), мы видим, что для моды β действительная и мнимая части произведения — $c_\beta \omega_\beta$ в точности совпадают соответственно с начальной координатой $Q_\beta(0)$ и с начальной скоростью $\dot{Q}_\beta(0)$. Таким образом, сложная молекула эквивалентна простому набору независимых гармонических осцилляторов.

Эти новые координаты Q_α , которые позволяют нам представить систему набором независимых осцилляторов, называются *нормальными координатами*. Используя лагранжиан (8.57), можно написать интеграл по траекториям, выражающий движение системы через нормальные координаты:

$$K = \int \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha=1}^n \int (\dot{Q}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2) dt \right] \right\} \mathcal{D}Q_1 \mathcal{D}Q_2 \dots \mathcal{D}Q_n. \quad (8.59)$$

Последнее выражение может быть получено и непосредственно из соотношения (8.35) с помощью подстановки $q_j(t) = \sum_{\alpha} a_{j\alpha} Q_\alpha(t)$.

Выражение с экспонентой упрощается здесь так же, как в случае классики, поскольку с точностью до постоянного множителя $\mathcal{D}q_1 \dots \mathcal{D}q_n = \mathcal{D}Q_1 \dots \mathcal{D}Q_n$; раз преобразование координат линейно, то якобиан равен некоторой константе; такая константа может быть включена в нормирующие множители

$\mathcal{D}Q_1(t) \dots \mathcal{D}Q_n(t)$ интеграла по траекториям. Записанный в такой форме интеграл можно преобразовать в произведение нескольких интегралов по траекториям:

$$K = \prod_{\alpha=1}^n \int \left\{ \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \int (\dot{Q}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2) dt \right] \right\} \mathcal{D}Q_\alpha, \quad (8.60)$$

где каждый из интегралов описывает теперь только одну моду и каждая мода соответствует простому одномерному осциллятору, решение для которого мы уже получили. Таким образом, может быть проанализирована любая задача для взаимодействующих гармонических осцилляторов.

Поскольку интеграл по траектории, записанный для ядра, можно преобразовать в произведение нескольких таких интегралов, то ясно, что (подобно тому, как было сделано в § 8 гл. 3) волновую функцию системы в данном энергетическом состоянии можно представить в виде произведения волновых функций от каждой моды.

В § 1 показано, что волновые функции каждой отдельной моды пропорциональны $\exp(iE_n t/\hbar)$, где E_n есть энергия моды. Произведение таких волновых функций будет тогда пропорционально $\exp[(it/\hbar) \sum_n E_n]$. Отсюда следует, что полная энергия системы осцилляторов равна сумме всех отдельных энергий. Энергия моды α равна $\hbar\omega_\alpha(m_\alpha + 1/2)$, где m_α — целое число. Энергия всей системы запишется тогда

$$E = \hbar\omega_1 \left(m_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2 \left(m_2 + \frac{1}{2}\right) + \dots + \hbar\omega_n \left(m_n + \frac{1}{2}\right), \quad (8.61)$$

где $m_1, m_2, \dots$ — все целые числа (включая и нуль). Здесь разрешен любой независимый выбор этих величин, так как возбуждения отдельных осцилляторов совершенно не связаны друг с другом.

Если $\varphi_n(Q)$ — волновая функция гармонического осциллятора, занимающего n -й уровень [см. формулу (8.7)], то волновая функция всей системы будет иметь вид

$$\varphi_{m_1}(Q_1) \varphi_{m_2}(Q_2) \dots \varphi_{m_n}(Q_n) = \prod_{\alpha=1}^n \varphi_{m_\alpha}(Q_\alpha). \quad (8.62)$$

Каждая функция $\varphi_{m_\alpha}(Q_\alpha)$ совпадает с выражением (8.7), если в нем частоту ω заменить на ω_α . Таким образом, представления классической физики, с помощью которых мы определили нормальные моды, и представления квантовой механики, с помощью которых нам удалось определить волновую функцию и энергетические уровни гармонического осциллятора, в сово-

купности дают полное решение задачи об определении энергетических уровней и собственных функций многоатомной молекулы.

С помощью преобразования (8.51) волновые функции состояний можно выразить в зависимости от первоначальных координат $q_i(t)$. Например, волновую функцию наинизшего энергетического

состояния системы с энергией $(\hbar/2) \sum_{\alpha=1}^n \omega_{\alpha}$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \prod_{\alpha=1}^n \exp\left(-\frac{Q_{\alpha}^2}{2\omega_{\alpha}}\right) = \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \frac{Q_{\alpha}^2}{\omega_{\alpha}}\right) = \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{a_{j\alpha} a_{k\alpha} q_j q_k}{\omega_{\alpha}}\right). \end{aligned} \quad (8.63)$$

Эта волновая функция экспоненциально зависит от квадратичной формы $-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n M_{jk} q_j q_k$, где матричный элемент

$$M_{jk} = \sum_{\alpha=1}^n \frac{a_{j\alpha} a_{k\alpha}}{\omega_{\alpha}}. \quad (8.64)$$

Задача 8.2. Покажите, что матрица M_{jk} равна единице, деленной на квадратный корень из матрицы v_{jk} , т. е. покажите, что

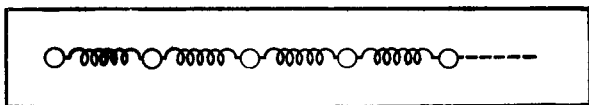
$$\sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n M_{jk} M_{kl} v_{lm} = \delta_{jm}. \quad (8.65)$$

Может оказаться, что некоторые частоты ω равны нулю. Например, для молекулы CO_2 моды от 5-й до 9-й, как это изображено на фиг. 8.1, имеют нулевую частоту. Эти моды соответствуют сдвигу или вращению молекулы как целого, т. е. движению, в котором нет возвращающей силы. Поскольку возвращающей силы здесь нет, то предположение о малости координат Q_{α} , вообще говоря, неверно. Поэтому необходим более точный анализ выражения для кинетической энергии, связанной с переносом или вращением системы в целом. Так как нас сейчас не интересуют такие движения, мы будем предполагать, что эти моды и соответствующие им координаты или вообще не существуют, или не возбуждаются в нашей задаче, так что мы имеем дело только с модами, для которых верно $\omega \neq 0$. Если при каких-либо значениях α решения ω_{α}^2 получаются отрицательными (а частоты ω — мнимыми), то это означает, что система находится в неустойчивом равновесии. Такое состояние подобно тому, в котором окажется карандаш, поставленный на острие. Функции, описывающие движение,

в этом случае будут уже не гармоническими, а экспоненциально расходящимися и смещения Q_α станут большими. Этот случай не представляет для нас сейчас интереса, и мы опять-таки предположим, что подобные моды отсутствуют.

§ 4. Одномерный кристалл

Простая модель. Можно представлять себе кристалл как большую многоатомную молекулу, каким-то образом упорядоченную в трехмерном объеме. Имеет смысл начать рассмотрение



Ф и г. 8.2. Модель одномерного «кристалла», в которой массы частиц расположены вдоль прямой и соединены между собой упругими связями — «пружинами».

этой молекулы с изучения простейшей одномерной модели, состоящей из одинаковых атомов, равномерно расположенных вдоль некоторой линии, как показано на фиг. 8.2. Положим массу каждого атома равной единице и обозначим смещение j -го атома от его положения равновесия через q_j . Предположим, что движение атомов может происходить лишь вдоль линии, по которой они расположены, т. е. ограничимся рассмотрением их продольного движения. Допустим далее, что каждый атом взаимодействует лишь с соседним атомом, что потенциал взаимодействия равен $V(R)$ и зависит только от расстояния R между атомами (т. е. что атомы как бы соединены друг с другом пружинами). При равновесии расстояние между атомами соответствует, очевидно, минимуму потенциала. Примем этот минимум за нуль отсчета энергии. Если ΔR — величина смещения атома от положения равновесия, то можно разложить этот потенциал в степенной ряд по ΔR таким же образом, как это делалось в выражении (8.32). При этом ограничимся такими малыми смещениями, чтобы все члены порядка выше второго в разложении можно было отбросить. Смещение атомов j и $(j+1)$ от положения равновесия можно записать так: $q_{j+1} - q_j = \Delta R_{j,j+1}$. Обозначим вторую производную потенциала по величине смещения через v^2 (величина, одинаковая для всех атомов системы). Тогда потенциальная энергия, связанная с таким смещением, равна

$$V_{j,j+1} = \frac{1}{2} v^2 (q_{j+1} - q_j)^2, \quad (8.66)$$

и лагранжиан может быть записан как

$$L = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \dot{q}_j^2 - \sum_{j=1}^{N-1} \frac{v^2}{2} (q_{j+1} - q_j)^2. \quad (8.67)$$

Если положения первого и последнего атомов не фиксированы, то член с $j = N$ в выражении для потенциальной энергии должен быть опущен.

Вытекающие из этого лагранжиана уравнения движения атомов в одномерной модели имеют вид

$$\ddot{q}_j = v^2 [(q_{j+1} - q_j) - (q_j - q_{j-1})] \quad (8.68)$$

для всех j , за исключением крайних значений $j = 1$ и $n = N$. Тот факт, что частицы, расположенные в концах системы, должны рассматриваться отдельно, в большинстве задач приводит лишь к незначительным трудностям. Обычно интересуются такими свойствами движений (а тела можно считать настолько большими), что влиянием поверхностных (или граничных) эффектов можно пренебречь. В таких случаях основные результаты действительно не будут зависеть от реальных граничных условий, т. е. от того, будут ли граничные атомы свободными или связанными, и т. д. Чтобы вообще исключить эту проблему, в теоретической физике, используется предположение о существовании особой системы простых граничных условий, так называемых периодических граничных условий, так что необходимость в рассмотрении граничных точек отпадает. Досадно, конечно, что такие специальные граничные условия в действительности выполняются редко (если они вообще выполняются), однако для явлений, которые не зависят от граничных эффектов, этот прием вполне оправдан.

Смысл его состоит в том, что цепочка атомов продолжается и дальше, за N -й атом, причем предполагается, что смещение $(N + j)$ -го атома всегда точно совпадает со смещением j -го атома. Таким образом, граничное условие можно записать как

$$q_{N+1} = q_1, \quad \dot{q}_{N+1} = \dot{q}_1. \quad (8.69)$$

Такое граничное условие заведомо будет выполняться, если исходную цепь атомов замкнуть в кольцо, подобно ожерелью из жемчужин. Однако в трехмерном случае это уже невозможно и граничные условия необходимо рассматривать только лишь как некоторый искусственный прием.

Таков смысл наших специальных граничных условий. Более общие случаи, например когда крайний атом связан с твердой стенкой или же остается свободным и т. д., сопровождаются отражением волн, пробегающих по системе. Такого отражения

не будет лишь в случае, когда крайний атом взаимодействует с атомом другой системы, имеющей аналогичные характеристики.

Таким образом, наши граничные условия можно сравнить с введением некоторой линии, сопротивление которой подавляет отражение. Подобное сопротивление, по сути дела, эквивалентно наличию некоторой бесконечной дополнительной линии. В нашем случае мы согласуем один конец системы с другим, связывая ее в кольцо. Эти граничные условия мы называли периодическими, поскольку все происходящее в k -й точке системы повторяется снова в $(N + k)$ -й точке, еще раз в $(2N + k)$ -й и т. д. При таком граничном условии уравнение (8.68) удовлетворяется для всех атомов системы.

Решение классических уравнений движения. Предположим, что смещение q периодически повторяется с частотой ω . Тогда нам нужно решить систему уравнений

$$\omega^2 q_j = v^2 (q_{j+1} - 2q_j + q_{j-1}). \quad (8.70)$$

Мы можем свернуть эти уравнения в определитель и преобразовать полученное детерминантное уравнение так, чтобы применить для отыскания решения известные теоремы математики. Однако ясно, что данные уравнения могут быть решены непосредственно, и это легче всего проделать указанным ниже способом.

Договоримся, что символ i будет означать лишь $\sqrt{-1}$, и не будем применять его для обозначения индексов. Решение имеет форму

$$q_j = A e^{i(j\beta - \omega t)} = a_j e^{-i\omega t}, \quad (8.71)$$

где β — некоторое постоянное. Это решение может быть проверено непосредственной подстановкой его в уравнения (8.70). Частота здесь определяется выражением

$$\omega^2 = v^2 (e^{i\beta} - 2 + e^{-i\beta}) = 4v^2 \sin^2 \frac{\beta}{2}. \quad (8.72)$$

Мы определили величину ω , выразив ее через β . Однако некоторые значения β здесь выброшены. Периодическое граничное условие требует, чтобы $\beta = 2\pi\alpha/N$, где $\alpha = 0, 1, 2, \dots, N-1$ (случай $\alpha = 0$ соответствует простому сдвигу цепочки, и мы можем, если пожелаем, не рассматривать его; более того, случай $\alpha = N + \alpha'$ совпадает с тем, что происходит при $\alpha = \alpha'$). Таким образом, для любого частного значения α можно выразить частоту в виде

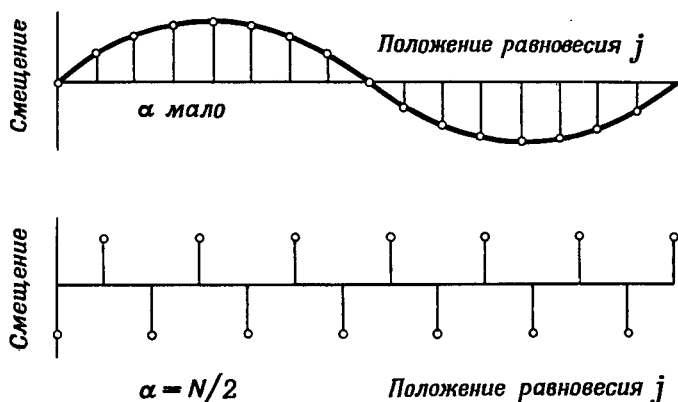
$$\omega_\alpha = 2v \sin \frac{\pi\alpha}{N}. \quad (8.73)$$

Амплитуда j -координаты, соответствующая этой частоте, равна

$$a_{j\alpha} = A e^{i2\pi\alpha j/N}. \quad (8.74)$$

Постоянные $a_{j\alpha}$, определенные последним соотношением, — комплексные числа. Вместо них можно было бы ввести действительные величины, комбинируя решения для α и $-\alpha$ (или для α и $N - \alpha$). Однако нам удобнее оставить их в комплексной форме. Кроме того, нам будет удобно рассматривать как положительные, так и отрицательные значения α ; при этом следует учесть, что если N является нечетным, то для рассмотрения области изменения α лучше взять пределы от $-1/2 (N-1)$ до $+1/2 (N-1)$, нежели от 0 до $N - 1$.

Относительные смещения атомов цепочки зависят от величины α . Например, для двух значений α , одно из которых мало,



Фиг. 8.3. Два случая колебаний.

Сдвиг атомов вдоль цепочки изображается смещениями по ординате от линии равновесного положения атомов j , равномерно распределенными вдоль оси абсцисс. Наверху длина волны велика по сравнению с расстоянием между атомами (α мало); внизу $\alpha = N/2$ и смещения уже не имеют вида гладкой синусоидальной волны.

а другое соответствует величинам порядка $N/2$, мы получим различные картины движения, как это показано на фиг. 8.3.

Относительная величина постоянных $a_{j\alpha}$ определена выражением (8.74), но у нас еще остается свобода в выборе нормировки, т. е. в определении константы A . Найдем ее значение из нормировочного соотношения, аналогичного соотношению (8.48), т. е. выберем A так, чтобы

$$\sum_{j=1}^N a_{j\alpha}^* a_{j\beta} = \delta_{\alpha\beta}; \quad (8.75)$$

отсюда следует

$$A = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (8.76)$$

Теперь мы уже можем по аналогии с выражением (8.42) выразить различные моды через нормальные координаты:

$$Q_\alpha = \sum_{j=1}^N a_{j\alpha} q_j = \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{\sqrt{N}} e^{ij \cdot 2\pi\alpha/N}, \quad (8.77)$$

где

$$q_j = \sum_{\alpha=1}^N c_\alpha a_{j\alpha} \exp(-i\omega_\alpha t).$$

Эти координаты будут также комплексными, но поскольку при подстановке этих величин лагранжиан должен быть действительным, запишем его в виде

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N (\dot{Q}_\alpha^* \dot{Q}_\alpha - \omega_\alpha^2 Q_\alpha^* Q_\alpha). \quad (8.78)$$

Видимо, подобное использование комплексных координат Q нуждается в некоторых объяснениях. Поскольку физические координаты q_j — действительные величины, то соотношение (8.77) подразумевает, что $Q_\alpha^* = Q_{-\alpha}$. Поэтому, хотя для определения каждой комплексной переменной Q_α необходимо иметь два действительных числа, т. е. всего $2N$ чисел, нам из них нужны только N независимых чисел. Если бы мы предпочли пользоваться действительными координатами, то можно было ввести их следующим образом:

$$Q_\alpha = (Q_\alpha^c - iQ_\alpha^s) \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (8.79)$$

$$Q_\alpha^c = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q_\alpha + Q_{-\alpha}),$$

$$Q_\alpha^s = \frac{i}{\sqrt{2}} (Q_\alpha - Q_{-\alpha}), \quad (8.80)$$

где α изменяется теперь уже только от 0 до $N-1$. В этом случае такие, например, выражения, как кинетическая энергия, будут иметь вид

$$\frac{1}{2} [(\dot{Q}_\alpha^c)^2 + (\dot{Q}_\alpha^s)^2] = \dot{Q}_\alpha \dot{Q}_{-\alpha} = \dot{Q}_\alpha \dot{Q}_\alpha^*. \quad (8.81)$$

Множитель $1/2$ возникает в выражении (8.78), поскольку мы суммируем по всем значениям α , положительным и отрицательным, учитывая при этом каждый член дважды, так как $Q_{-\alpha}^* Q_{-\alpha} = Q_\alpha Q_\alpha^*$. Таким образом, квадратичное выражение, полученное ранее для действительных величин, теперь выглядит уже как

произведение сопряженных комплексных чисел [см., например, (8.75)].

Задача 8.3. Покажите, что Q_α^c и Q_α^s — нормальные координаты, представляющие соответственно стоячие волны $\sqrt{2} \cos(2\pi\alpha j/N)$ и $\sqrt{2} \sin(2\pi\alpha j/N)$, т. е. что для нечетных N

$$q_j = \sum_{\alpha=0}^{1/2(N-1)} Q_\alpha^c \sqrt{2} \cos \frac{2\pi\alpha j}{N} + \sum_{\alpha=0}^{1/2(N-1)} Q_\alpha^s \sqrt{2} \sin \frac{2\pi\alpha j}{N}. \quad (8.82)$$

Задача 8.4. Выразив начальную волновую функцию через координаты Q_α^c и Q_α^s , покажите, что волновая функция основного состояния, соответствующего лагранжиану (8.78), может быть представлена в виде

$$\Phi = A \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\alpha=0}^N \frac{Q_\alpha^* Q_\alpha}{\omega_\alpha} \right), \quad (8.83)$$

где A — постоянная.

Задача 8.5. Матричный элемент перехода, в котором используется одна и та же волновая функция для начального и конечного состояний, называется *ожидаемой величиной*¹⁾. Таким образом, ожидаемая величина функционала F в состоянии Φ , заданном выражением (8.83), равна

$$\langle \Phi_0 | F | \Phi_0 \rangle = \int \dots \int \Phi_0^* F \Phi_0 dQ_0 dQ_1 \dots dQ_N. \quad (8.84)$$

Покажите, что имеют место следующие ожидаемые величины:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | Q_\alpha | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | Q_\alpha^* | \Phi_0 \rangle = 0, \\ \langle \Phi_0 | Q_\alpha^2 | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | Q_\alpha^{*2} | \Phi_0 \rangle = 0, \end{aligned} \quad (8.85)$$

$$\langle \Phi_0 | Q_\alpha^* Q_\alpha | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2\omega_\alpha} \langle \Phi_0 | 1 | \Phi_0 \rangle,$$

$$\langle \Phi_0 | Q_\alpha^* Q_\beta | \Phi_0 \rangle = 0 \quad \text{при } \alpha \neq \beta.$$

Таким образом, с помощью лагранжиана, выраженного через нормальные координаты, нам удалось свести рассмотрение системы к рассмотрению набора независимых простых гармонических осцилляторов. Квантовомеханическая часть решения здесь полу-

¹⁾ Сравните это определение *ожидаемой величины* с определением *ожидаемого значения* оператора в § 3 гл. 5 [см., в частности, формулу (5.46)].

чается совершенно аналогично тому, как это было сделано для случая многоатомной молекулы. При этом нам необходимо знать только квантовомеханическое решение для свободного гармонического осциллятора.

Задача 8.6. Покажите, что константы $a_{j\alpha}$ будут теми же и тогда, когда связь атомов осуществляется не непосредственно с ближайшими соседями, а имеет некоторое протяжение и данный атом посредством постоянной взаимодействия λ_k оказывается связанным с удаленным от него k -м атомом. Предполагая, что величина λ_k быстро убывает с ростом k , определите частоту ω_α при наличии подобной связи, т. е. когда потенциальная энергия определяется уже не выражением (8.66), а другим, подобным ему, но учитывающим относительные смещения всех возможных пар (каждое из которых умножается на соответствующее λ_k), т. е. $V = (v^2/2) \sum_k \sum_j \lambda_k (q_{k+j} - q_j)^2$.

§ 5. Приближение непрерывной среды

Параметры мод, которые мы определяли до сих пор, соответствуют случаю, когда каждый атом совершает колебания с некоторым фазовым сдвигом по отношению к другому атому рассматриваемой цепочки, т. е. когда по цепочке атомов бежит волна колебаний. Если фазовый сдвиг между соседними атомами мал, то длина волны велика.

Поведение атомов в таких длинноволновых модах представляет особый интерес. Если длина волны существенно превосходит расстояния между атомами, то этими расстояниями можно пренебречь. В таком случае движение очень хорошо описывается с помощью модели «непрерывной среды». Цепочка атомов здесь может быть представлена как непрерывный стержень с усредненными определенным образом свойствами, такими, как масса, приходящаяся на единицу длины $\rho = 1/d$ (вспомним, что массу каждого атома мы положили равной единице). Разумеется, с физической точки зрения реальный стержень на самом деле является дискретным набором атомов. Однако в этом параграфе мы будем рассматривать приближение непрерывной среды, заменив цепочку атомов сплошной струной.

Для некоторой моды с индексом α фазовый сдвиг между смежными атомами равен $2\pi\alpha/N$, так что волна охватывает N/α атомов; если d — расстояние между соседними атомами при равновесии, то длина волны равна $\lambda = Nd/\alpha$. Волновое число

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\alpha}{Nd}. \quad (8.86)$$

Волновой подход позволяет математически более четко представить себе движение, но для этого нужно немного изменить обозначения. Каждой моде мы припишем свое значение k взамен употреблявшегося ранее индекса α . Тогда суммирование по модам (по индексам α) перейдет в сумму по дискретным величинам k , которые будут целыми числами, умноженными на $2\pi/L$ (где $L = Nd$ — полная длина струны). Предположим, что $x_j = jd$ определяет равновесное положение j -го атома. Тогда уравнения, описывающие движение атома, принимают вид

$$a_{jk} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikh_j}, \quad (8.87)$$

$$Q_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N q_j e^{ikh_j}, \quad (8.88)$$

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N Q_k e^{-ikh_j} \quad (8.89)$$

и

$$\omega_k = 2v \sin \frac{kd}{2}. \quad (8.90)$$

Предположим теперь, что расстояние между атомами очень мало по сравнению с длиной, на которой происходит изменение возмущения. Выше мы уже видели, что условием такой ситуации является $kd \ll 1$. Если обозначить произведение $vd = c$, то для малых kd имеем $\omega \approx kc$. В этом случае можно представлять себе координаты q_j как функции, описывающие положение атомов в цепочке, т. е. определять смещение j -го атома, как это показано на фиг. 8.3. В случае длинных волн смещения $q(x_j)$ и $q(x_j + 1)$ приблизительно равны, и мы можем рассматривать функцию $q(x)$ как гладкую непрерывную функцию положения атома в цепочке. Нормальная координата Q_k является фурье-образом функции $q(x)$, т. е. уравнение (8.88) можно заменить на

$$Q(k) = \frac{\sqrt{N}}{L} \int_0^L q(x) e^{ikhx} dx. \quad (8.91)$$

Эта замена основывается на приближенном соотношении

$$\sum_{j=1}^N ()_j \approx \frac{N}{L} \int_0^L () dx, \quad (8.92)$$

которое выполняется тем точнее, чем меньше расстояние между отдельными точками. Подобное же соотношение, а именно

$$\sum_{k=1}^N ()_k \approx \frac{L}{2\pi} \int_0^{2\pi/d} () dk, \quad (8.93)$$

приводит нас к обратному преобразованию

$$q(x) = \frac{L}{2\pi \sqrt{N}} \int_0^{2\pi/d} Q(k) e^{-ikx} dk. \quad (8.94)$$

Чтобы представить величины в их непосредственном физическом смысле, положим реальное значение смещения j -го атома равным u_j , т. е. $q_j = \sqrt{m} u_j$, где m — масса атома, равная ρd . Пусть U — фурье-образ величины u , т. е.

$$U(k) = \int_0^L u(x) e^{ikx} dx; \quad (8.95)$$

тогда обратное преобразование даст

$$u(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} U(k) e^{-ikx} dk. \quad (8.96)$$

Нормальной координатой теперь будет $U(k)$; через прежнюю нормальную координату $Q(k)$ она выражается так:

$$U(k) = \frac{\sqrt{mL}}{\sqrt{N}} Q(k). \quad (8.97)$$

Выражение для кинетической энергии, куда входит величина $u(x, t)$, можно получить с помощью соотношения (8.92):

$$\text{кинетическая энергия} = \frac{1}{2} \int \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 dx. \quad (8.98)$$

Чтобы выразить потенциальную энергию через новые переменные, необходимо представить разность смещений двух смежных атомов как непрерывную функцию от координат. Используя приближение непрерывной среды, можно записать

$$q_{j+1} - q_j = \sqrt{m} [u(x_{j+1}, t) - u(x_j, t)] \approx d \sqrt{m} \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (8.99)$$

Это означает, что потенциальная энергия равна

$$V = \frac{v^2 d^2}{2} \frac{m}{d} \int_0^L \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 dx = \frac{\rho c^2}{2} \int_0^L \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 dx. \quad (8.100)$$

В последнем равенстве используем константу $c = \nu d$, которую принято называть коэффициентом упругости. Определить ее физически можно следующим образом. Предположим, что мы растягиваем цепочку атомов, которая имеет длину L , и при этом единичный элемент удлиняется на отрезок ε , т. е. новая длина системы составит $L(1 + \varepsilon)$. (Мы рассматриваем статическое растяжение, а не вибрацию.) Это означает, что расстояние между каждой парой атомов увеличится до $d(1 + \varepsilon)$ и, следовательно, разность смещений смежных атомов будет равна

$$q_{j+1} - q_j = \varepsilon d \sqrt{m}. \quad (8.101)$$

Используя выражение (8.66), мы получаем величину потенциальной энергии, запасенной в струне при растяжении

$$V = \frac{\nu^2}{2} \varepsilon^2 d^2 m N = \frac{\rho c^2}{2} \varepsilon^2 L. \quad (8.102)$$

Таким образом, в пределе при малом ε сила, необходимая для растяжения струны, равна

$$\frac{V}{\varepsilon L} = \rho c^2 \varepsilon. \quad (8.103)$$

Последнее равенство дает напряжение в струне, когда деформация (растяжение на единицу длины) равна ε . Итак, мы имеем

$$\frac{\text{напряжение}}{\text{деформация}} = \rho c^2 = \text{постоянная упругости}. \quad (8.104)$$

Комбинируя выражения (8.98) и (8.100), можно записать лагранжиан так:

$$L = \frac{\rho}{2} \int \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 dx - \frac{\rho c^2}{2} \int \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 dx. \quad (8.105)$$

Фундаментальные моды, которые мы здесь рассматриваем, имеют вид $\exp(ikx)$, а нормальные координаты имеют вид $U(k, t)$. Читатель может самостоятельно показать, что если выразить лагранжиан через эти нормальные координаты, то получится

$$L = \frac{\rho}{2} \int \left[\frac{\partial U(k, t)}{\partial t} \right]^2 \frac{dk}{2\pi} - \frac{\rho c^2}{2} \int k^2 U^2(k, t) \frac{dk}{2\pi}. \quad (8.106)$$

Систему, которая описывается этим лагранжианом, можно интерпретировать как некий набор гармонических осцилляторов; при этом каждому осциллятору соответствует свое значение k . В принятом нами приближении непрерывной среды k является непрерывной переменной, пробегающей бесконечное число значений. Можно было бы снова вернуться к картине дискретного расположения атомов, вспомнив, что интеграл по dk на самом

деле является суммой по дискретным значениям k , причем соседние значения k отличаются друг от друга на величину $2\pi/L$ (L — длина струны), а общее число их равно числу атомов в системе.

Уравнения движения можно выразить в непрерывных переменных, если найти экстремум для интеграла действия $\int_0^T L dt$. Используя лагранжиан L из выражения (8.105), получаем

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \rho c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (8.107)$$

С помощью рассуждений, подобных выводу соотношения (8.99), можно показать, что это уравнение аналогично ранее полученному уравнению движения (8.68). Уравнение (8.107) имеет решение

$$u = e^{-i\omega t} a(x), \quad (8.108)$$

в точности совпадающее с выражением (8.71), где

$$-\omega^2 a = c^2 \left(\frac{da}{dx} \right)^2, \quad (8.109)$$

и в полном соответствии с выражениями (8.70) и (8.74)

$$a(x) = e^{ikx}. \quad (8.110)$$

Сопоставляя между собой (8.109) и (8.110), мы видим, что частота $\omega = kc$ аналогична частоте, определяемой выражением (8.90), которое фактически сводится к этому значению в пределе при малых k .

Движение, описываемое решением (8.108), где коэффициент a определяется формулой (8.110), соответствует бегущей волне, движущейся со скоростью c , т. е., говоря точнее, c определяет скорость, с какой распространялся бы звук вдоль этой цепочки атомов. На самом же деле в системе наблюдается дисперсия, т. е. ω не будет пропорциональна k . Для длин волн порядка атомных расстояний, подобное отклонение от пропорциональности будет уже существенным, что видно из выражения (8.90).

§ 6. Квантовомеханическое рассмотрение цепочки атомов

Мы видели, что поведение цепочки атомов можно представить набором мод движения, где каждая мода соответствует одному гармоническому осциллятору. Энергетическое состояние каждого такого осциллятора задается некоторым квантовым числом его моды. Каждой моде отвечает одно волновое число k и своя частота

та ω . Энергия моды частоты ω принимает значения $\hbar\omega/2$, $3\hbar\omega/2$, $5\hbar\omega/2$, ..., или 0 , $\hbar\omega$, $2\hbar\omega$, ..., если отсчитывать ее от основного уровня $\hbar\omega/2$. В этом случае можно сказать, что в колебании присутствуют 0 , 1 , 2 , ... *фононов* с волновым числом k (или с частотой ω).

Возможно, что одновременно будет возбуждаться несколько различных мод. Например, мы можем иметь: 1) моду с волновым числом k_1 , которая будет возбуждена до первого уровня, если отсчитывать от ее основного, т. е. нулевого, состояния; 2) моду с волновым числом k_2 , возбужденную также до своего первого уровня; 3) моду с волновым числом k_3 , возбужденную до своего второго уровня.

Тогда состояние всей системы будет соответствовать полной энергии $\hbar(\omega_1 + \omega_2 + 2\omega_3)$. В этом случае говорят, что в системе присутствуют четыре фонона: один фонон с волновым числом k_1 , один — с волновым числом k_2 и два с волновым числом k_3 .

Основное состояние всей системы будет иметь энергию

$$E_{\text{осн}} = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2}. \quad (8.111)$$

Если воспользоваться приближением непрерывной среды и положить $\omega = kc$, то это выражение приобретает вид

$$E_{\text{осн}} = \frac{L}{2\pi} \int_0^{k_{\text{макс}}} \frac{\hbar kc}{2} dk. \quad (8.112)$$

Заметим, что если верхний предел $k_{\text{макс}}$ в этом интеграле устремить к бесконечности, то интеграл станет расходящимся. Однако равенство $\omega = kc$, которое мы здесь использовали, выполняется только в случае длинных волн (т. е. для малых значений k).

Можно уточнить величину энергии основного состояния, применив точное выражение для частоты ω и подобрав разумный верхний предел в интеграле по k . Так, выбрав ω_k в виде (8.90), получим для энергии основного состояния значение

$$E_{\text{осн}} = \int_{k=-k_{\text{макс}}}^{k=k_{\text{макс}}} \frac{\hbar}{2} v \sin \frac{kd}{2}, \quad (8.113)$$

где

$$k_{\text{макс}} = \frac{2\pi}{d}. \quad (8.114)$$

Это можно переписать в виде

$$\sum_{n=-N/2}^{n=N/2} \hbar \nu \left| \sin \frac{\pi n}{N} \right| = 2\hbar \nu (\text{Im}) \sum_{n=0}^{N/2} e^{i\pi n/N}. \quad (8.115)$$

Для очень больших N этот результат можно аппроксимировать выражением

$$E_{\text{осн}} = 2\hbar cL \frac{1}{\pi d^2}. \quad (8.116)$$

Отсюда видно, что энергия пропорциональна длине нашей системы и неограниченно растет, когда межатомное расстояние d стремится к нулю, т. е. энергия основного состояния в случае непрерывной среды не определена. Понятно, что для реальных объектов энергия всегда имеет конечное значение.

Обычно очень удобно измерять вместо самой полной энергии системы разность между ней и энергией основного состояния. В пользу этого можно высказать два соображения: 1) на самом деле энергия основного состояния неизвестна, да и не представляет интереса для большинства физических задач (например, в энергию основного состояния входят энергии всех электронов, налетающих на атом); 2) когда мы имеем дело лишь с возбуждением длинных волн, приближение непрерывной среды оказывается очень полезным и дает хорошие оценки энергии возбуждения. Однако это же приближение дает неразумный результат для энергии основного состояния, поскольку мы пренебрегаем расстоянием между атомами d (т. е. полагаем $d = 0$). Таким образом, если мы пользуемся приближением непрерывной среды, то должны избегать вычислений энергии основного состояния.

§ 7. Трехмерный кристалл

В принципе нет большого различия между реальным трехмерным кристаллом и рассмотренным нами одномерным примером. Однако теперь конкретное вычисление различных модовых частот будет намного сложнее. Можно снова применить понятие о волновом числе $\mathbf{k}$, которое теперь уже оказывается вектором с компонентами k_x , k_y и k_z . Частоты, если записать их через эти компоненты, вообще говоря, будут иметь очень сложный вид. Благодаря наличию поляризации (различных направлений колебаний) для каждого значения $\mathbf{k}$ получим несколько решений. Далее, реальный кристалл часто состоит не из массива равномерно расположенных атомов, но скорее из единичных ячеек, причем каждая такая ячейка сама содержит группу атомов, размещающихся в пространстве

по некоторому геометрическому закону. Если в такой единичной ячейке содержится, скажем, p атомов, то этот пример можно иллюстрировать одномерной моделью; тогда в целом у нас имеется набор из $3p$ значений частот для каждой величины $\mathbf{k}$.

В трехмерном кристалле тоже можно с хорошим приближением использовать модель непрерывной среды. При этом решеточная структура кристалла, вообще говоря, заменяется на непрерывную, а особенности решетки проявляются в различии свойств непрерывной среды по направлениям (например, в анизотропии сжимаемости). Симметрия решетки находит свое выражение в симметрии констант упругости. Более того, направления колебаний (поляризация) мод не обязательно будут параллельны или перпендикулярны направлению распространения волны.

В нашем рассмотрении будем предполагать, что система обладает одинаковыми постоянными упругости по всем направлениям (вообще говоря, в произвольном кристалле это необязательно, даже если он симметричен подобно кубическому кристаллу). В этом случае у нас будут возникать колебания двух видов: продольные и поперечные, с различной скоростью, которую мы обозначим через c_L для продольных и через c_T для поперечных волн. Каждому $\mathbf{k}$ соответствуют три моды. Одна из них имеет частоту $\omega_L = c_L k$ (k — модуль вектора $\mathbf{k}$). Поскольку, по предположению, направление волны не влияет на ее частоту, то последняя будет функцией лишь абсолютной величины волнового числа k , не зависящей от направлений; поэтому возникают две поперечные моды (т. е. такие, когда движения атомов перпендикулярны направлению движения волны), причем обе имеют одинаковую частоту $\omega_T = c_T k$.

Каждая отдельная мода, которой соответствует определенное направление поляризации, ведет себя подобно независимому осциллятору.

Предположим, что мы имеем дело с кристаллом объема V . Попробуем подсчитать количество мод, волновые числа которых лежат в элементарном k -объеме $d^3\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$ и около значения $\mathbf{k}$. Мы предполагаем кристалл прямоугольным с длинами граней L_x, L_y и L_z . Применив результаты, полученные в одномерном рассмотрении, видим, что дискретные величины k_x различаются друг от друга на $2\pi/L_x$, так что в интервале dk_x имеется $dk_x L_x / 2\pi$ дискретных значений k_x . Применяя те же самые соображения к другим направлениям, мы найдем, что число дискретных значений $\mathbf{k}$ во всем объеме $d^3\mathbf{k}$ составляет

$$\frac{dk_x dk_y dk_z}{(2\pi)^3} L_x L_y L_z = \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} V. \quad (8.117)$$

Этот результат получен нами (переходя к большим кристаллам) для кристалла любой формы.

В общем случае модовая частота ω_k , как мы уже упоминали, является очень сложной функцией k , имеющей несколько ветвей значений для одного и того же k , но ее определение есть задача классической физики, поэтому вид колебаний в основных модах, как и описывающие их нормальные координаты, будут известны. Квантовомеханическая задача сводится в этом случае к рассмотрению простого набора осцилляторов, и отсюда уже нетрудно определить все свойства квантовомеханической системы. Возбуждение каждой моды обычно называется возбуждением фонона.

В качестве очень простого конкретного примера рассмотрим моды продольных колебаний в изотропном твердом теле (т. е. продольную составляющую звуковых волн). Можно начать такое рассмотрение тем же путем, что и в одномерном случае для дискретно расположенных атомов, переходя далее к длинноволновому пределу — приближению непрерывной среды.

Полное решение такой задачи определило бы нам все эффекты дисперсии, комплексные ветви решений и поперечные волны, что, конечно, весьма интересно. Однако нет необходимости выполнять все эти шаги для того, чтобы получить квантовомеханический аналог приближения непрерывной среды. Можно непосредственно воспользоваться результатами классической физики; вся процедура, включающая переход от дискретных точечных масс к длинноволновому пределу, оказывается в квантовомеханическом рассмотрении столь же полезной и оправданной, как и в классическом. Лагранжиан в обоих случаях (если ограничиться рассмотрением потенциалов, с достаточной точностью представимых квадратичной функцией смещений) имеет одинаковую форму. Причина такого сходства результатов классического и квантового подходов в том, что задача сводится к линейному преобразованию — переходу к нормальным координатам в рамках приближения непрерывной среды, а эти операции и там и тут имеют одинаковый вид.

Выпишем теперь уравнения, получающиеся в классическом рассмотрении. Пусть $u(\mathbf{r}, t)$ выражает смещение частицы, координата которой в положении покоя есть $\mathbf{r}$. Допустим, что наше рассмотрение проводится в длинноволновой области, и, следовательно, мы можем применить приближение непрерывной среды. Мода, соответствующая плоской волне, легче всего описывается с помощью преобразования Фурье, которое в этом случае имеет вид

$$U(\mathbf{k}, t) = \int_V u(\mathbf{r}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{r}, \quad (8.118)$$

где $\mathbf{r}$ — пространственный вектор с компонентами x, y, z . Нормальные координаты различных мод зависят от соотношения между направлением U и направлением вектора $\mathbf{k}$, т. е. координата

$U_x(\mathbf{k}, t)$ вектора $\mathbf{U}$ не обязательно представляет нормальную моду. Для изотропной среды три моды, определяемые вектором $\mathbf{k}$, имеют следующие нормальные координаты:

$$U_1(\mathbf{k}, t) = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{U}}{k} \quad (8.119)$$

(т. е. компоненту U в направлении k)

$$U_2(\mathbf{k}, t) = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{U}, \quad (8.120)$$

$$U_3(\mathbf{k}, t) = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{U}, \quad (8.121)$$

где $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$ — два единичных вектора, перпендикулярных и $\mathbf{k}$, и между собой. Ограничим наше рассмотрение той частью кинетической и потенциальной энергии, которая соответствует продольным модам, определенным соотношением (8.119), и не будем обращать внимания на поперечные колебания.

Используя классические результаты, можно написать лагранжиан для продольных мод в виде

$$L = \frac{\rho}{2} \iiint \left\{ \left[\frac{\partial U_1(\mathbf{k}, t)}{\partial t} \right]^2 - c^2 k^2 [U_1(\mathbf{k}, t)]^2 \right\} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (8.122)$$

Мы ввели здесь скорость звука $c = \omega/k$, которая является функцией от направления распространения волны. Выражение (8.122) представляет собой прямое обобщение одномерного примера. В первоначальных переменных $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ лагранжиан запишется так:

$$L = \frac{\rho}{2} \iiint \left[\left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|^2 - c^2 (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right] d^3 \mathbf{r}. \quad (8.123)$$

Первый член в правой части этого выражения — кинетическая энергия, равная половине массы, умноженной на квадрат скорости. Второй член выражает энергию сжатия, определяемого дивергенцией $\nabla \cdot \mathbf{u}$ (деформация сжатия). Энергию поперечной деформации мы здесь не рассматриваем, поскольку пренебрегаем поперечными волнами.

Варьируя лагранжиан по $\mathbf{u}$, получаем классическое уравнение движения:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = -\nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}). \quad (8.124)$$

Если мы определим деформацию сжатия как дивергенцию $\mathbf{u}$, т. е. как

$$\varphi = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (8.125)$$

то уравнение перепишется в виде

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -\nabla^2 \varphi, \quad (8.126)$$

что в точности совпадает с классическим волновым уравнением.

Выполнив преобразование Фурье уравнения (8.124) и сохранив лишь компоненту $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, параллельную вектору $\mathbf{k}$, получим

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U_1}{\partial t^2} = k^2 U_1. \quad (8.127)$$

Это не что иное, как уравнение отдельного гармонического осциллятора. Отсюда видно, что $U_1(\mathbf{k}, t)$ действительно является нормальной координатой.

Из лагранжиана, записанного в виде (8.123), можно легко получить нужные квантовомеханические результаты; например, уровни энергии лежат на величину $\Delta E = n\hbar(kc)$ выше энергии основного состояния.

Вычислим амплитуду перехода из состояния, соответствующего некоторой фиксированной системе координат $\mathbf{u}(\mathbf{r}, 0)$, к состоянию с другой системой координат $\mathbf{u}(\mathbf{r}, T)$. Эта амплитуда имеет вид

$$\begin{aligned} K[\mathbf{u}(\mathbf{r}, T), T; \mathbf{u}(\mathbf{r}, 0), 0] = \\ = \int \left(\exp \left\{ -\frac{i\rho}{2\hbar} \int_0^T \int_0^{L_z} \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \left[\left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|^2 - c^2 (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right] d^3\mathbf{r} dt \right\} \right) \mathcal{D}^3 \mathbf{u}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (8.128)$$

Интегрирование распространяется здесь на траектории $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, выраженные через все три компоненты вектора $\mathbf{r}$ и время t . Конечно, совершенно необязательно требовать, чтобы функция $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ имела один и тот же вид и в начальном и конечном состояниях. Здесь мы приходим к интересному развитию нашей первоначальной идеи об интеграле по траекториям. До сих пор подынтегральные выражения были функционалами одной или, возможно, нескольких функций $x(t)$ одного аргумента t , а интегрирование выполнялось по всем таким траекториям (функциям). Теперь мы должны интегрировать функционал от функции $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ четырех аргументов x, y, z и t и брать интеграл по траекториям, соответствующим всем значениям этой функции. Все необходимые при этом вычисления можно выполнить с помощью описанной выше стандартной методики, поскольку подынтегральное выражение здесь, как и раньше, является гауссовым функционалом.

Первый шаг при вычислении такого интеграла заключается в отыскании траектории, приводящей к стационарному значению интеграла под знаком экспоненты, соответствующей лагран-

жиану (8.123) или, что более удобно, волновому уравнению (8.126). Мы должны учесть граничные условия при $t = 0$ и $t = T$. Удовлетворить граничным условиям в данном случае не проблема, однако это несколько отличается от обычной классической задачи физики, где при $t = 0$ значения координат и их производных, т. е. $u(\mathbf{r}, 0)$ и $(\partial u / \partial t)_{t=0}$, заданы.

Мы могли бы следовать этим путем, однако из предыдущих примеров нам уже известно, что подобную задачу лучше всего предварительно преобразовать к нормальным координатам и интегрировать по траекториям лишь потом. Такое преобразование имеет вид

$$K = \int_{U_1(0)}^{U_1(T)} \left\{ \exp \left[-\frac{i\rho}{2\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \int (\dot{U}_1^2 - k^2 c^2 U_1^2) dt \right] \right\} \mathcal{D}U_1(\mathbf{k}, t), \quad (8.129)$$

где граничные условия заданы соотношениями

$$\begin{aligned} U_1(T) &= U_1(\mathbf{k}, T) = \frac{\mathbf{k}}{k} \cdot \iiint e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{u}(\mathbf{r}, T) d^3\mathbf{r}, \\ U_1(0) &= U_1(\mathbf{k}, 0) = \frac{\mathbf{k}}{k} \cdot \iiint e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{u}(\mathbf{r}, 0) d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (8.130)$$

Мы перешли к более простому типу интеграла по траекториям, где траектория описывается лишь как функция одной переменной t . Поскольку интеграл по траекториям может быть выражен произведением нескольких таких интегралов, каждый из которых будет определять движение только для одной нормальной моды, мы видим, что подобную задачу уже решали. Результат [см. выражение (8.10)] запишется в виде

$$\begin{aligned} K &= \prod_{\mathbf{k}} \left(\frac{\rho k c}{2\pi i \hbar \sin k c T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i\rho k c}{2\hbar \sin k c T} \left\{ [U_1^2(\mathbf{k}, T) + U_1^2(\mathbf{k}, 0)] \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \cos k c T - 2U_1(\mathbf{k}, T) U_1(\mathbf{k}, 0) \right\} \right). \end{aligned} \quad (8.131)$$

Произведение берется по всем значениям компонент вектора $\mathbf{k}$; например, компонента k_x принимает значения $2\pi n_x / L$, где n_x — целое число, изменяющееся от 0 до $N = L_x / d$ (напомним, что здесь d — расстояние между атомами и что изучаемое тело имеет ребра длиной L_x , L_y и L_z). Конечно, приближение непрерывной среды подразумевает нулевое расстояние между атомами, а это означает, что число сомножителей произведения в пределе неограничено. Однако мы не будем касаться этой проблемы и сконцентрируем наше внимание только на той части выражения, которая содержит зависимость от начальных и конечных координат. Поэто-

му, пренебрегая радикалом перед экспоненциальным членом в правой части выражения (8.131), можно приближенно написать это выражение как

$$K \sim \exp \frac{i}{2\hbar} \iint \int k c \{ [U_1^2(\mathbf{k}, T) + U_1^2(\mathbf{k}, 0)] \times \\ \times \cos kcT - 2U_1(\mathbf{k}, T) U_1(\mathbf{k}, 0) \} (\sin kcT)^{-1} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (8.132)$$

Выражение (8.132) сохраняет зависимость амплитуды от граничных значений $U_1(\mathbf{k}, 0)$ и $U_1(\mathbf{k}, T)$. Для любого выбора этих функций [а они, как видно из формул (8.130), в свою очередь зависят от функций $u(\mathbf{r}, 0)$ и $u(\mathbf{r}, T)$] в соотношении (8.132) может быть формально выполнено интегрирование и получен искомым результат. Таким образом, можно, хотя бы в принципе, получить ответ на все вопросы о поведении квантовомеханической системы.

§ 8. Квантовая теория поля

Предположим, что мы имеем дело с волнами или модами, которые описываются непрерывными функциями, такими, как $u(\mathbf{r}, t)$, в которых или вообще не учитывается структура среды, или длины волн настолько велики, что такой структурой можно пренебречь. В этом случае скажем, что $u(\mathbf{r}, t)$ является полем, т. е. функцией каждой точки пространства. В одном из примеров уже рассматривалось поле упругости, т. е. поле звуковых колебаний. При такой терминологии уравнения движения называются уравнениями поля. В данной главе мы будем иметь дело только с линейными уравнениями поля; лагранжиан назовем лагранжианом поля; нормальные координаты $U(\mathbf{k}, t)$ будут координатами нормальных мод поля. Описание этих мод в виде квантовых осцилляторов обычно называется *квантованием поля*. Поэтому и сама теория именуется квантовой теорией поля, с тем чтобы отличать ее от классического способа рассмотрения уравнений поля.

Как мы уже видели, основная часть усилий в квантовой теории поля затрачивается на решение классических уравнений движения для отыскания нормальных мод, описание которых не выходит за рамки классической физики. Последующее «квантование» в сущности заключается лишь в дополнительном утверждении, что каждая из нормальных мод — квантовый осциллятор с уровнями энергии $\hbar\omega(n + 1/2)$. Изложенная таким образом квантовая теория поля оказывается лишь частным следствием уравнения Шредингера, а не какой-то сверхтеорией, объясняющей все.

Так будет и так должно быть в любом случае, когда переменные самого поля (подобно звуковым волнам или давлению) в итоге

выражаются только лишь через некоторые комбинации основных механических переменных. Эти основные переменные описывают положения частиц (атомов, электронов, ядер и т. д.), реально образующих среду, в которой возбуждается поле. Например, рассматривая звуковые процессы, мы предполагаем, что уравнение Шредингера описывает движение элементов структуры вещества, т. е. атомов в кристалле. Отсюда ясно, что длинноволновые звуковые колебания подчиняются классическим линейным уравнениям поля, в то время как моды оказываются квантованными.

В немногих случаях классические уравнения полей относятся к таким (давно известным) системам, для которых квантовомеханическое исследование на основе уравнения Шредингера до сих пор еще не проделано. Например, применив классическую аналогию, можно получить уравнения для колебательного описания ядерной материи [5]. Превосходная идея о том, что моды поля можно в этом случае рассматривать как квантовые осцилляторы, позволила составить и решить квантовые уравнения. Таких примеров в физике осталось немного.

В квантовой механике имеется и другой тип уравнений, принципиально отличный от всех рассмотренных выше. Примером может служить система линейных уравнений Максвелла для электромагнитного поля. Эта система приводит к волновому уравнению, вполне аналогичному тому, что мы уже вывели для звука, однако в этом случае имеют место совершенно другие поляризационные свойства. Подобно тому, как в трубе органа образуются стоячие волны, электромагнитное поле в замкнутом объеме также имеет, если его рассматривать классически, набор фундаментальных мод. Отсюда естественно предположить, что эти колебания квантованы и каждая мода определяется энергетическим уровнем, превышающим основное состояние системы на $\Delta E = \hbar\omega_n$, и т. д. Это — основное предположение квантовой электродинамики. Нельзя сказать, что такой вывод строго следует из уравнения Шредингера, потому что электромагнитное поле не понимается здесь в смысле длинноволнового приближения к среде, имеющей атомную структуру. Сегодня мы уже не думаем о какой-то специальной среде для подобного рассмотрения электромагнитного поля, а считаем, что уравнения Максвелла описывают некий фундаментальный закон природы. Мы просто предполагаем, что они квантуются и именно тем простым способом, который описан выше. В гл. 9 обсудим этот вопрос более подробно.

Гипотеза о квантуемости электромагнитных полей согласуется со всеми экспериментами, проделанными до сих пор, хотя здесь имеются и некоторые теоретические трудности. Они связаны с необходимостью распространения этой схемы на моды, соответствующие очень малым длинам волн. При этом возникают раз-

личные эффекты, которые приводят к расходимости интегралов, если интегрирование по длинам волн распространяется вплоть до нуля. Подобные же трудности появляются и в рассмотрении вибраций кристалла при попытке исследовать область очень коротких волн, где длины их оказываются сравнимы с межатомными расстояниями, т. е. когда приближение непрерывности уже непригодно. Тогда мы просто отказываемся от такого приближения и этим ограничиваем число нормальных мод в кристалле конечного объема; в то же время в электродинамике количество мод в любом объеме бесконечно.

Для обозначения мод различных полей обычно используются разные названия. Кванты звука или колебаний в кристалле обычно называются *фононами*, кванты в теории электромагнитного поля — *фотонами*, в теории мезонных полей — *мезонами* и т. д. Даже электроны можно представлять себе в виде возбуждений поля, но это поле будет совсем непохоже на те, которые мы до сих пор рассматривали. Его обычно называют ферми-полем; частицы при этом подчиняются принципу исключения и лагранжиан квантуется не путем перехода к набору гармонических осцилляторов, как это делалось выше, а несколько иным способом. Частицы, возникающие при квантовании полей как моды гармонических осцилляторов, обычно называются бозе-частицами; они подчиняются симметричной статистике (статистике Бозе). Это означает, что если две частицы имеют соответственно волновые числа k_1 и k_2 , то для них существует только одно состояние и нет такого состояния, где первой соответствовало бы значение k_2 , а второй — значение k_1 . Это ясно из того, что наше поле имеет только одно состояние, в котором моды имеют волновые числа k_1 и k_2 и возбуждены до их первых уровней. Такое состояние определяется энергией $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2$, и здесь бессмысленно задавать вопрос: если поменять эти частицы местами, то какой из них соответствует возбуждение? В гл. 9 обсудим этот вопрос более детально на примере фотонов электромагнитного поля.

Задача 8.7. Считают, что нейтральные частицы с нулевым спином (подобные π^0 -мезонам) в свободном состоянии можно представить полем φ с лагранжианом

$$L = \int \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - c^2 |\nabla \varphi|^2 + \frac{\mu^2 c^4}{\hbar^2} \varphi^2 \right] d^3\mathbf{r} dt, \quad (8.133)$$

где μ — некоторая константа.

Покажите, что это поле имеет квантовые состояния, соответствующие волнам $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ с энергией возбуждения

$$\hbar\omega = \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 + \mu^2 c^4}. \quad (8.134)$$

Если $\hbar \mathbf{k} = \mathbf{p}$ рассматривать как импульс кванта, энергия запишется в виде

$$E = \sqrt{|\mathbf{p}|^2 c^2 + \mu^2 c^4}. \quad (8.135)$$

Это релятивистская формула для энергии частицы с импульсом $\mathbf{p}$ и массой μ (отметим, что для малого p^2 можно приближенно положить $E = \mu c^2 + p^2/2\mu + \dots$, т. е. E равно энергии покоя μc^2 плюс кинетическая энергия $p^2/2\mu$).

Состояние поля, когда мода с волновым числом $\mathbf{k}_1$ возбуждена до второго квантового уровня, мода $\mathbf{k}_2$ — до первого и т. д., мы будем интерпретировать как состояние системы, имеющей две частицы с импульсом $\hbar \mathbf{k}_1$, одну с импульсом $\hbar \mathbf{k}_2$ и т. д. За основное принимается состояние, в котором нет ни одной частицы; оно называется состоянием вакуума. Переход осцилляторов поля на возбужденные уровни и обратно соответствует рождению и аннигиляции частиц; именно таким образом эти процессы и рассматриваются в релятивистской квантовой теории.

§ 9. Гармонический осциллятор, на который действует внешняя сила

В этой главе мы изучали простой гармонический осциллятор и системы, которые могли быть сведены к совокупности таких осцилляторов. Однако осцилляторы, которые до сих пор рассматривались, были свободными, т. е. они ни с чем не взаимодействовали и на них не действовала никакая сила. Теперь нужно обобщить наше рассмотрение, включив в него такие линейные системы, которые взаимодействуют с другими объектами или движутся под действием внешних сил. Примерами такого рода могут быть многоатомные молекулы в переменных внешних полях: сталкивающиеся многоатомные молекулы; кристаллы, через которые проходят электроны и возбуждают моды колебаний осцилляторов; наконец, любые другие взаимодействия мод с внешними полями. Мы не будем здесь обсуждать проблему взаимодействия в общем случае; вместо этого рассмотрим как образец один из примеров взаимодействия атомных систем и зарядов с электромагнитным полем. Обобщение этого примера выполним в следующей главе. Другие случаи могут быть проанализированы аналогичным образом.

Все эти проблемы включают в себя два аспекта: 1) разложение поля на совокупность независимых осцилляторов; 2) взаимодействие каждого из таких осцилляторов с внешним потенциалом или с другими системами. Разложение поля на совокупность независимых осцилляторов уже было подробно рассмотрено нами в этой главе.

Чтобы быть готовым к рассмотрению проблемы в целом, остается только исследовать поведение отдельного осциллятора под действием внешнего потенциала. Полное рассмотрение проблемы будет дано в следующей главе.

Для начала вернемся несколько назад к изучению отдельного гармонического осциллятора, но будем учитывать его линейное взаимодействие с некоторым внешним потенциалом (возмущений). Лагранжиан для такой системы запишем в виде

$$L = \frac{M}{2} \dot{x}^2 - \frac{M\omega^2}{2} x^2 - \gamma(t)x, \quad (8.136)$$

где $\gamma(t)$ — внешняя сила. Для удобства примем, что эта сила действует только в интервале времени от $t = 0$ до $t = T$, так что осциллятор является свободным как в начальном состоянии при $t = 0$, так и в конце при $t = T$. Подобная задача была уже нами полностью решена, когда в задаче 3.11 мы вычисляли амплитуду $K(b, a)$ вероятности перехода осциллятора из точки x_a в момент времени $t = 0$ в точку x_b в момент $t = T$. Но для нас сейчас была бы необходима амплитуда перехода G_{mn} для осциллятора, который первоначально находился в состоянии n , а затем в момент T оказался в состоянии m . Такой подход часто оказывается более удобным, чем координатное рассмотрение.

В § 1 мы определили волновые функции φ_n для свободного гармонического осциллятора, а в задаче 3.11 вычислили ядро, описывающее вынужденное движение гармонического осциллятора. Исходя из этого, можно определить амплитуду G_{mn} прямыми подстановками в выражение

$$G_{mn} = e^{(i/\hbar)E_m T} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x_b) K(x_b, T; x_a, 0) \varphi_n(x_a) dx_a dx_b. \quad (8.137)$$

Для случая $m = n = 0$ этот интеграл будет гауссовым, несколько утомительным в оценке, но не представляющим никаких особых трудностей. В результате получим

$$G_{00} = \exp \left[-\frac{1}{2m\omega\hbar} \int_0^T \int_0^t \gamma(t) \gamma(s) e^{-i\omega(t-s)} ds dt \right]. \quad (8.138)$$

Если m и n не равны нулю, то интеграл оказывается несколько более сложным. Однако можно использовать тот же способ, который мы уже применяли в задаче 8.1. Попытаемся найти амплитуду вероятности перехода вынужденного гармонического осциллятора, на который действует внешняя сила, из состояния f в состояние g ,

если эти состояния соответствуют условиям задачи 8.1. Искомая амплитуда будет равна

$$\begin{aligned}
 F(b, a) &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} G_{mn} f_m^*(b) f_n(a) e^{-iE_m T/\hbar} = \\
 &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} G_{mn} \left\{ \exp \left[-\frac{M\omega}{4\hbar} (a^2 + b^2) \right] \right\} \times \\
 &\quad \times \frac{a^n b^m}{\sqrt{m!n!}} \left(\frac{M\omega}{2\hbar} \right)^{(m+n)/2} e^{-i\omega T/2}, \quad (8.139)
 \end{aligned}$$

где M — масса частицы [см. выражение (8.28)]. Если мы сможем вычислить этот функционал, то получим G_{mn} , умножая $F(b, a)$ на $\exp[(M\omega/4\hbar)(a^2 + b^2)]$ и разлагая полученное выражение в ряды по степеням a и b . Поэтому нам удобнее сперва вычислить

$$\begin{aligned}
 F(b, a) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{M\omega}{2\hbar} (x_2 - b)^2 \right] \times \\
 &\quad \times K(x_2 T; x_1, 0) \exp \left[-\frac{M\omega}{2\hbar} (x_1 - a)^2 \right] dx_1 dx_2, \quad (8.140)
 \end{aligned}$$

где $K(x_2, T; x_1, 0)$ — ядро, описывающее гармонический осциллятор под действием внешней силы [см. (3.66)]. Переменные интегрирования здесь появляются только как квадратичные величины в экспоненте подынтегрального выражения, так что все интегрирование легко может быть выполнено. После некоторых простых, но довольно утомительных алгебраических преобразований получаем

$$\begin{aligned}
 F(b, a) &= \left\{ \exp \left[-\frac{M\omega}{4\hbar} (a^2 + b^2 - 2abe^{-i\omega T}) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + i \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} (a\beta + b\beta^* e^{-i\omega T}) - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{1}{2M\omega\hbar} \int_0^T \int_0^t \gamma(t) \gamma(s) e^{-i\omega(t-s)} ds dt \right] \right\} e^{-i\omega T/2}, \quad (8.141)
 \end{aligned}$$

где

$$\beta = \frac{1}{M \sqrt{2\omega}} \int \gamma(t) e^{-i\omega t} dt, \quad (8.142)$$

$$\beta^* = \frac{1}{M \sqrt{2\omega}} \int \gamma(t) e^{+i\omega t} dt. \quad (8.143)$$

Величины G_{00} могут быть легко получены из выражения (8.141) подстановкой $a = b = 0$. Результат совпадает с выражением (8.138).

Умножая далее на экспоненту, как описано выше, и обозначая

$$x = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} a, \quad y = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} b e^{-i\omega T},$$

найдем, что

$$\sum_{m=0} \sum_{n=0} G_{mn} \frac{x^n y^m}{\sqrt{m!} \sqrt{n!}} = [\exp(xy + i\beta x + i\beta^* y)] G_{00}. \quad (8.144)$$

Раскладывая правую часть в ряд по x и по y и сравнивая члены, получаем окончательный результат:

$$G_{mn} = \frac{G_{00}}{\sqrt{m!n!}} \sum_{r=0}^l \frac{m!}{(m-r)! r!} \frac{n!}{(n-r)! r!} r! (i\beta)^{n-r} (i\beta^*)^{m-r}, \quad (8.145)$$

где l , равное m или n , принимает сколь угодно большие целые значения.

Таким образом, мы полностью решили задачу о гармоническом осцилляторе, на который действует внешняя сила. В гл. 9 мы еще раз вернемся к этой проблеме и используем полученные здесь результаты.

КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

В этой главе исследуется взаимодействие заряженных частиц с электромагнитным полем. Мы уже рассмотрели один пример такого взаимодействия в § 6 гл. 7, где переменные электромагнитного поля входили в потенциальную часть лагранжиана; переменные поля представлялись там векторным потенциалом A . При этом мы имели дело лишь с движением частиц в некотором заданном поле; очевидно, что при таком подходе нельзя ничего сказать о том, как возникает само поле A , или о том, как движущиеся частицы влияют на него. Другими словами, постановка задачи не включала в себя никакого исследования динамики поля. Подобный подход, основанный на использовании заданных потенциалов, конечно, является приближением. Он оправдан, когда размеры установок, с помощью которых создаются потенциалы, настолько велики, что движение частиц никак не влияет на величину потенциалов.

Теперь мы будем интересоваться не только влиянием потенциалов на движение частиц, но и влиянием самих частиц на потенциалы. Начнем с классического подхода и применим для описания электромагнитного поля уравнения Максвелла; они выражают параметры поля через плотности зарядов и токов окружающего вещества.

В предыдущих главах мы уже видели, что квантовомеханическое описание некоторых классических систем легко дать в тех случаях, когда классические законы можно выразить на языке принципа наименьшего действия. Так, если экстремальное значение действия S , варьируемого по некоторой переменной q , приводит к классическим уравнениям движения, то соответствующие квантовомеханические законы выражаются следующим образом: амплитуда вероятности некоторого заданного события, соответствующая действию S , равна интегралу по траекториям от функции $e^{iS/\hbar}$, взятому по всем возможным путям изменения переменной q , при которых выполнены условия осуществления данного события.

Для такого подхода крайне существенно, что основные законы классической электродинамики, выражаемые уравнениями Максвелла, тоже могут быть сформулированы с помощью принципа наименьшего действия. Пусть существует действие S ,

которое можно представить через векторный и скалярный потенциалы $\mathbf{A}$ и φ ; определение экстремального значения этого действия при варьировании его по переменным поля $\varphi(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ приводит к формулировке электромагнетизма, эквивалентной уравнениям Максвелла. Тогда, рассуждая по аналогии, мы будем искать законы квантовой электродинамики, исходя из правила: амплитуда вероятности какого-либо события равна

$$K(2; 1) = \int_1^2 e^{i/\hbar S[\mathbf{A}, \varphi]} \mathcal{D}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathcal{D}\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (9.1)$$

где интеграл по траекториям берется по всем значениям потенциалов $\mathbf{A}$ и φ в каждой точке пространства — времени и вдоль всех путей, удовлетворяющих определенным граничным условиям в начальной и конечной мировых точках события.

§ 1. Классическая электродинамика

Уравнения Максвелла. Начнем изучение электромагнитного поля, исходя из обычных классических уравнений Максвелла.

Пусть магнитная проницаемость и диэлектрическая постоянная равны их значениям для свободного пространства. Тогда уравнения Максвелла имеют вид

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (9.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi\mathbf{j} \right), \quad (9.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (9.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (9.5)$$

где $\mathbf{E}$ — напряженность электрического поля, $\mathbf{B}$ — напряженность магнитного поля, c — скорость света, $\mathbf{j}$ — плотность тока и ρ — плотность заряда. Эти уравнения справедливы только в случае сохранения заряда, т. е. когда

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (9.6)$$

Из уравнения (9.4) следует, что пока $\mathbf{B}$ можно записать как ротор некоторого вектора $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (9.7)$$

Это соотношение еще не полностью определяет вектор $\mathbf{A}$, однако эту неоднозначность можно устранить, полагая

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (9.8)$$

Такой выбор становится нежелательным, когда мы заведомо стремимся сохранить полную релятивистскую четырехмерную симметрию уравнений. Это не означает, конечно, что результаты, полученные с помощью (9.8), не являются релятивистски-инвариантными, что было бы при произвольном выборе величины $\nabla \cdot \mathbf{A}$; скорее их инвариантность не представляется очевидной. Так или иначе, мы будем рассматривать лишь нерелятивистское приближение, поскольку у нас нет простого интеграла по траекториям, соответствующего уравнению Дирака. Нашей задачей является сейчас выяснение основных свойств квантованного электромагнитного поля и рассмотрение сильно упростится, если принять условие (9.8).

Подставив $\mathbf{E} + (1/c)(\partial \mathbf{A}/\partial t)$ в уравнение (9.5), видим, что ротор этого выражения равен нулю, и, следовательно, оно может быть представлено в виде градиента некоторого потенциала

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (9.9)$$

Уравнения (9.2)–(9.5) легко решаются в случае отсутствия зарядов и токов. Из (9.2), (9.8) и (9.9) мы видим, что

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\nabla^2 \varphi = 4\pi\rho. \quad (9.10)$$

Если $\rho = 0$, то $\varphi = 0$ и $\mathbf{E} = -(1/c)(\partial \mathbf{A}/\partial t)$. При этом из уравнения (9.3), если $\mathbf{j} = 0$, следует

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (9.11)$$

[так как $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$]. Таким образом, каждая компонента вектора $\mathbf{A}$ удовлетворяет волновому уравнению.

Если разложить вектор $\mathbf{A}$ в ряд по бегущим плоским волнам

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}, \quad (9.12)$$

то уравнение для амплитуды $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ запишется как $\ddot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}} = -c^2 k^2 \mathbf{a}_{\mathbf{k}}$; отсюда следует, что каждая компонента $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ — амплитуда простого гармонического осциллятора с частотой $\omega = kc$. Однако в действительности существуют только две независимые поперечные волны, а компонента вектора $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ в направлении $\mathbf{k}$ должна быть равна нулю. Это следует из уравнения (9.8), которое можно переписать в виде

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}} = 0. \quad (9.13)$$

Таким образом, поле в вакууме можно представить как совокупность свободных гармонических осцилляторов, причем каждому значению $\mathbf{k}$ будут соответствовать две поперечные волны.

Задача 9.1. Покажите, что в плоской волне векторы $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ и $\mathbf{k}$ взаимно перпендикулярны.

Решение уравнений Максвелла при наличии зарядов и токов. Разложим опять потенциалы $\mathbf{A}$ и φ , а также плотности заряда и тока по плоским волнам:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) &= \sqrt{4\pi} c \int \mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \\ \varphi(\mathbf{R}, t) &= \int \varphi_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \\ \mathbf{j}(\mathbf{R}, t) &= \int \mathbf{j}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \\ \rho(\mathbf{R}, t) &= \int \rho_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Задача 9.2. Объясните, почему плотность заряда, соответствующая единичному заряду e , находящемуся в точке $\mathbf{q}(t)$ в момент времени t , имеет вид

$$\rho(x, y, z, t) = e \delta[x - q_x(t)] \delta[y - q_y(t)] \delta[z - q_z(t)] = e \delta^3[\mathbf{R} - \mathbf{q}(t)].$$

Покажите, что фурье-образ плотности заряда

$$\rho_{\mathbf{k}} = e e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}(t)}. \quad (9.15)$$

Легко видеть, что плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{R}, t)$ равна $e \dot{\mathbf{q}}(t) \delta^3[\mathbf{R} - \mathbf{q}(t)]$. Если мы имеем систему зарядов e_i , расположенных в точках $\mathbf{q}_i(t)$, то выражения для $\rho_{\mathbf{k}}$ и $\mathbf{j}_{\mathbf{k}}$ запишутся в виде

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_i e_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}_i(t)}, \quad \mathbf{j}_{\mathbf{k}} = \sum_i e_i \dot{\mathbf{q}}_i(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}_i(t)}. \quad (9.16)$$

При этом условие (9.13) остается справедливым, и им можно воспользоваться для упрощения некоторых выражений. Коэффициент разложения вектора $\mathbf{B}$ равен $\mathbf{B}_{\mathbf{k}} = \sqrt{4\pi} c i (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}})$, соответствующий коэффициент для вектора $\mathbf{E}$ равен $\mathbf{E}_{\mathbf{k}} = -i\mathbf{k}\varphi_{\mathbf{k}} - \sqrt{4\pi}\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$, наконец, коэффициент разложения $\nabla \cdot \mathbf{E}$ имеет вид $i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}} = k^2\varphi_{\mathbf{k}}$, поэтому

$$k^2\varphi_{\mathbf{k}} = 4\pi\rho_{\mathbf{k}} \quad (9.17)$$

или $\varphi_{\mathbf{k}} = 4\pi\rho_{\mathbf{k}}/k^2$. Функция $\varphi_{\mathbf{k}}$ полностью определяется плотностью заряда $\rho_{\mathbf{k}}$, и при этом нет необходимости решать какие-либо динамические дифференциальные уравнения, содержащие, например, $\ddot{\varphi}_{\mathbf{k}}$.

Задача 9.3. Докажите, что соотношение $\varphi_{\mathbf{k}} = 4\pi\rho_{\mathbf{k}}/k^2$ означает следующее: величина $\varphi_{\mathbf{k}}$ в любой момент времени t представляет

собой кулоновский потенциал от всех зарядов в этот момент; так что, если, например, плотность ρ соответствует некоторой совокупности зарядов e_i , отстоящих на расстояние r_i от некоторой точки, то потенциал ϕ в этой точке равен $\sum_i e_i/r_i$.

Именно в этом и заключается смысл уравнения (9.10).

Уравнение (9.3), которое нужно еще решить, запишем в виде

$$i\mathbf{k} \times \mathbf{B}_\mathbf{k} = \frac{1}{c} \dot{\mathbf{E}}_\mathbf{k} + \frac{1}{c} 4\pi \mathbf{j}_\mathbf{k}. \quad (9.18)$$

При этом учтем, что $i\mathbf{k} \times \mathbf{B}_\mathbf{k} = -\sqrt{4\pi} c \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_\mathbf{k}) = \sqrt{4\pi} c k^2 \mathbf{a}_\mathbf{k}$ и $\dot{\mathbf{E}}_\mathbf{k} = -i\mathbf{k}\phi_\mathbf{k} - \sqrt{4\pi} \dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k}$. Далее, применив равенство (9.17), заменим $\phi_\mathbf{k}$ на $4\pi\rho_\mathbf{k}/k^2$ и будем иметь

$$\ddot{\mathbf{a}}_\mathbf{k} + k^2 c^2 \mathbf{a}_\mathbf{k} = \sqrt{4\pi} \left(\mathbf{j}_\mathbf{k} - \frac{i\mathbf{k}\rho_\mathbf{k}}{k^2} \right) = \sqrt{4\pi} \mathbf{j}'_\mathbf{k}, \quad (9.19)$$

где величину $\mathbf{j}'_\mathbf{k} = \mathbf{j}_\mathbf{k} - i\mathbf{k}\rho_\mathbf{k}/k^2$ можно назвать поперечной частью тока $\mathbf{j}_\mathbf{k}$. Из закона сохранения тока (9.6) следует, что $\rho_\mathbf{k} = -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}_\mathbf{k}$, поэтому

$$\mathbf{j}'_\mathbf{k} = \mathbf{j}_\mathbf{k} - \frac{\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}_\mathbf{k})}{k^2}. \quad (9.20)$$

Последнее равенство означает, что $\mathbf{j}'_\mathbf{k}$ равно разности тока $\mathbf{j}_\mathbf{k}$ и его компоненты по направлению вектора $\mathbf{k}$. Очевидно, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}'_\mathbf{k} = 0$.

Мы, безусловно, существенно упростили уравнения Максвелла, и если не считать мгновенного кулоновского взаимодействия между частицами, то для каждого значения вектора $\mathbf{k}$ вся картина свелась к уравнениям для двух поперечных волн. Амплитуда колебаний каждой волны описывается гармоническим осциллятором, на который действует сила, равная компоненте тока по соответствующему направлению. Другими словами, если выбрать два направления, перпендикулярных вектору $\mathbf{k}$, и обозначить компоненты $\mathbf{a}_\mathbf{k}$ по этим направлениям как $a_{1\mathbf{k}}$ и $a_{2\mathbf{k}}$, то уравнения Максвелла запишутся в виде

$$\ddot{a}_{1\mathbf{k}} + k^2 c^2 a_{1\mathbf{k}} = \sqrt{4\pi} j_{2\mathbf{k}}, \quad (9.21)$$

$$\ddot{a}_{2\mathbf{k}} + k^2 c^2 a_{2\mathbf{k}} = \sqrt{4\pi} j_{1\mathbf{k}}, \quad (9.22)$$

где $j_{1\mathbf{k}}$ и $j_{2\mathbf{k}}$ — компоненты вектора тока $\mathbf{j}_\mathbf{k}$ по соответствующим направлениям (спрашивается, почему можно говорить о компонентах вектора $\mathbf{j}_\mathbf{k}$, а не вектора $\mathbf{j}'_\mathbf{k}$).

Принцип наименьшего действия. В квантовой электродинамике¹⁾ предполагается, что описываемые уравнениями (9.21) и (9.22) осцилляторы являются квантовыми. Чтобы выполнить квантование, нужно записать принцип наименьшего действия, который дает нам уравнения электромагнитного поля и уравнения движения частиц в этом поле. Определим полное действие как сумму

$$S = S_1 + S_2 + S_3. \quad (9.23)$$

Здесь

$$S_1 = \sum_i \frac{m_i}{2} \int |\dot{\mathbf{q}}_i|^2 dt \quad (9.24)$$

— действие для всех частиц без учета поля (если между частицами действуют и другие силы, кроме электромагнитных, их также следует включить в действие S_1);

$$\begin{aligned} S_2 &= \int \left[\rho(\mathbf{R}, t) \varphi(\mathbf{R}, t) - \frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{R}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) \right] d^3\mathbf{R} dt = \\ &= \sum_i e_i \int \left\{ \varphi[\mathbf{q}_i(t), t] - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{q}}_i(t) \cdot \mathbf{A}[\mathbf{q}_i(t), t] \right\} dt \end{aligned} \quad (9.25)$$

— действие, описывающее взаимодействие поля и частиц;

$$\begin{aligned} S_3 &= \frac{1}{8\pi} \int (E^2 - B^2) d^3\mathbf{R} dt = \\ &= \frac{1}{8\pi} \int \left[\left| -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right|^2 - |\nabla \times \mathbf{A}|^2 \right] d^3\mathbf{R} dt \end{aligned} \quad (9.26)$$

— действие свободного поля. В этих выражениях нужно варьировать функции $\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$, $\varphi(\mathbf{R}, t)$ и $\mathbf{q}_i(t)$.

Задача 9.4. В § 1 гл. 2 мы обсуждали вывод уравнений движения классической механики из условия экстремальности действия ($\delta S = 0$ с точностью до первого порядка в разложении по δq). Покажите, что уравнения Максвелла можно вывести с помощью действия, заданного выражением (9.23), если потребовать выполнения условия $\delta S = 0$ в первом порядке вариаций по переменным $\mathbf{A}$ и φ .

Так как уравнения электродинамики имеют наиболее простой вид в переменных $\mathbf{a}_k$, то удобно выразить и действие в этих пере-

¹⁾ Следует указать, что ряд физиков применяет термин «квантовая электродинамика» в более широком смысле, включая в это понятие теорию электрон-позитронных пар. Мы не занимаемся этой проблемой и поэтому слова «квантовая электродинамика» означают здесь просто теорию квантования электромагнитного поля.

менных. Подстановка формулы (9.14) в выражение для действия S_3 дает

$$\begin{aligned} S_3 &= \frac{1}{2} \int \left(\left| \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}} + i\mathbf{k} \frac{\varphi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{4\pi}} \right|^2 - c^2 |\mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\mathbf{k}}|^2 \right) \frac{d^3\mathbf{k} dt}{(2\pi)^3} = \\ &= \frac{1}{2} \int \left(\varphi_{\mathbf{k}}^2 \frac{k^2}{4\pi} + \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}}^* \cdot \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}} - k^2 c^2 \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^* \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}} \right) \frac{d^3\mathbf{k} dt}{(2\pi)^3}, \end{aligned} \quad (9.27)$$

а действие S_2 при этом принимает вид

$$S_2 = \int (\rho_{-\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} - \sqrt{4\pi} \mathbf{j}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}}) \frac{d^3\mathbf{k} dt}{(2\pi)^3}. \quad (9.28)$$

После подстановки в эти выражения фурье-образа потенциала $\varphi_{\mathbf{k}} = 4\pi\rho_{\mathbf{k}}/k^2$ члены, содержащие $\varphi_{\mathbf{k}}$, дают в сумме

$$S_c = -\frac{4\pi}{2} \int \frac{\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}}{k^2} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|}. \quad (9.29)$$

Здесь мы воспользовались формулой (9.16), а также значением интеграла $\int (4\pi/k^2) [\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})] d^3\mathbf{k} = 1/R$. Выражение (9.29) в точности соответствует кулоновскому взаимодействию зарядов в том виде, как оно обычно применяется при рассмотрении атома, когда пренебрегают электромагнитным излучением.

Включим его в функцию действия для частиц

$$S_{\text{част}} = S_1 + S_c = \int \sum_i \left(\frac{m_i}{2} \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_j \frac{e_i e_j}{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|} \right) \quad (9.30)$$

и запишем $S = S_{\text{част}} + S_{\text{взаим}} + S_{\text{поле}}$. Таким образом мы разделили действие S_3 для электромагнитного поля на две части. Одна из них описывает вклад, обусловленный мгновенным кулоновским взаимодействием; оставшуюся часть назовем действием $S_{\text{поле}}$, которое соответствует полю излучения (учет излучения обеспечивает все поправки к мгновенному полю, например поправки, связанные с запаздыванием суммарного воздействия электромагнитного поля и поправки на скорость распространения этого взаимодействия, которая не превышает скорости света). Действие, соответствующее полю излучения, получится, если из функции действия S_3 выбросить члены, содержащие $\varphi_{\mathbf{k}}$. В результате получим

$$S_{\text{поле}} = \frac{1}{2} \int (\dot{a}_{1\mathbf{k}}^* \dot{a}_{1\mathbf{k}} - k^2 c^2 a_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{k}} + \dot{a}_{2\mathbf{k}}^* \dot{a}_{2\mathbf{k}} - k^2 c^2 a_{2\mathbf{k}}^* a_{2\mathbf{k}}) \frac{d^3\mathbf{k} dt}{(2\pi)^3}, \quad (9.31)$$

а это не что иное, как действие, описывающее осцилляторы поля излучения. Действие, обусловленное взаимодействием этих осцил-

ляторов с частицами, равно

$$S_{\text{взаим}} = V\sqrt{4\pi} \int (j_{1,-k}a_{1k} + j_{2,-k}a_{2k}) \frac{d^3k dt}{(2\pi)^3}. \quad (9.32)$$

Простая вариация полного действия S по переменным a_{1k} и a_{2k} дает уравнения движения (9.21) и (9.22).

В развернутом виде действие $S_{\text{взаим}}$ записывается так:

$$S_{\text{взаим}} = V\sqrt{4\pi} \sum_j \int (a_{1k}\dot{q}_{1j} + a_{2k}\dot{q}_{2j}) e^{ik \cdot q_j(t)} \frac{d^3k dt}{(2\pi)^3}, \quad (9.33)$$

где q_{1j} и q_{2j} — поперечные (по отношению к вектору $\mathbf{k}$) компоненты вектора q_i . Таким образом, все законы нерелятивистской механики и классической электродинамики получаются из требования, чтобы действие S , представленное суммой выражений (9.30), (9.31) и (9.33), оставалось неизменным при вариациях вдоль траекторий, заданных переменными $q_j(t)$, $a_{1k}(t)$, $a_{2k}(t)$. Переход к квантовой электродинамике осуществляется путем интегрирования по этим траекториям экспоненты $e^{iS/\hbar}$ и рассматривается в § 2.

§ 2. Квантовая механика поля излучения

Наше рассмотрение мы начнем с квантовой механики поля излучения в пустом пространстве. В условиях вакуума полное действие содержит лишь часть, связанную с полем излучения

$$S = S_{\text{поле}}, \quad (9.34)$$

которая имеет вид (9.31) и, очевидно, соответствует действию S для совокупности гармонических осцилляторов. В гл. 8 уже рассматривался ряд примеров с выражениями типа (9.31).

Предположим, что к квантовой электродинамике можно перейти, рассмотрев эти осцилляторы как квантовомеханические; справедливость такого допущения тоже обсуждалась нами в гл. 8. Каждому значению $\mathbf{k}$ в нашей системе соответствуют две бегущие волны с поляризацией 1 и 2 и частотой $\omega = kc$. Для каждой из этих волн (например, волны с амплитудой a_{1k}) возможные энергетические уровни будут равны

$$E_{1k} = \left(n_{1k} + \frac{1}{2}\right) \hbar kc, \quad (9.35)$$

где n_{1k} — произвольное положительное целое число или нуль.

Если $n_{1k} = 1$, то говорят, что имеется один фотон с поляризацией 1 и импульсом $\hbar k$. В общем случае мы имеем n_{1k} таких фотонов, и энергия каждого из них равна $\hbar kc$.

Задача 9.5. Пусть импульс электромагнитного поля задается в виде $(1/4\pi c) \int \mathbf{E} \times \mathbf{B} d(\text{объем})$. Покажите, что в вакууме (при этом $\varphi_k = 0$) последнее выражение равно $\int \mathbf{k} (\mathbf{a}_k^* \cdot \dot{\mathbf{a}}_k) d^3\mathbf{k} / (2\pi)^3$.

Позднее, при рассмотрении взаимодействия вещества с полем излучения, обнаружится, что вещество излучает или поглощает энергию отдельными фотонами с энергией $\hbar\omega$. Это, очевидно, согласуется с первоначальной гипотезой Планка.

Тот факт, что n -е состояние осциллятора можно рассматривать как совокупность n «частиц» или «фотонов», кажется очень поразительным и неожиданным; однако значения энергии в обоих описаниях совпадают. Вместе с тем существует одно обстоятельство, на которое стоит обратить внимание до того, как мы начнем описывать поведение совокупности частиц состояниями осциллятора. Допустим, что из всех чисел n_j отличны от нуля лишь два (например, $n_a = 1$, $n_b = 1$). Эту ситуацию мы вправе интерпретировать двумя фотонами, один из которых находится в состоянии a , а другой — в состоянии b . Однако при таком подходе существуют два допустимых описания, отвечающих одной и той же энергии; в самом деле, ничто не мешает нам считать, что первый фотон находится в состоянии b , а второй — в состоянии a . Чтобы найти выход из этого положения, рассмотрим конкретный пример. Пусть мы имеем две α -частицы, координаты которых обозначим соответственно через x и y ; состояние частицы x будем описывать функцией $f(x)$, а частицы y — функцией $g(y)$. Тогда волновая функция системы выражалась бы функцией двух переменных: x и y :

$$\psi(x, y) = f(x) g(y). \quad (9.36)$$

Обратной ситуации, когда частица y находится в состоянии f , а частица x — в состоянии g , соответствует другая волновая функция:

$$\psi(x, y) = g(x) f(y), \quad (9.37)$$

которая, вообще говоря, отличается от первой. Но если наши частицы полностью тождественны, как это имеет место в случае α -частиц, то эти два состояния неразличимы. Мы уже говорили в гл. 1, что в квантовой механике должно быть правило (не зависящее от уравнения Шредингера), согласно которому амплитуды для двух случаев, различающихся лишь перестановкой α -частиц, всегда следует суммировать. При этом система описывается единственной волновой функцией

$$\psi(x, y) = f(x) g(y) + g(x) f(y) \quad (9.38)$$

(нормированной соответствующим образом: если f и g ортонормальны, то нормировочная константа равна $1/\sqrt{2}$; если же они

равны и нормированы, то эта константа равна $1/2$). Вообще $\psi(x, y) = \psi(y, x)$ для α -частиц и всех других частиц, подчиняющихся статистике Бозе. Система двух таких частиц всегда описывается единственным образом, и при этом не различается, какая именно из них находится в состоянии f , а какая в состоянии g .

Нетрудно видеть, что все наши выводы согласуются между собой, если мы будем рассматривать набор возбужденных состояний осциллятора как набор фотонов, а сами фотоны считать бозе-частицами. Тогда единичное состояние $n_a = 1$, $n_b = 1$ соответствует ситуации, когда имеются два фотона — один в состоянии a , а другой в состоянии b . Их перестановка не приводит к новому состоянию.

Для электронов с параллельными спинами или для других тождественных ферми-частиц амплитуды, наоборот, вычитаются:

$$\psi(x, y) = f(x)g(y) - g(x)f(y) \quad (9.39)$$

Волновая функция системы двух ферми-частиц всегда антисимметрична: $\psi(x, y) = -\psi(y, x)$. Поэтому такая система не безразлична по отношению к перестановке частиц. В самом деле, если в формуле (9.39) положить $f = g$, то получим $\psi(x, y) = 0$. К фотонам и α -частицам это не относится; подобный случай у фотонов соответствует состояниям осциллятора с $n = 2$.

Можно указать один частный случай, когда с помощью некоторой идеализации электромагнитное поле в присутствии вещества удастся описать ненамного сложнее, чем поле в вакууме. Это случай полого резонатора (или волновода), стенки которого можно считать идеально проводящими. Как хорошо известно из классической теории, при этом возникает набор мод с более или менее сложным распределением электромагнитных полей. Классическая функция действия и в этом случае сводится к функции действия для совокупности свободных осцилляторов, но переменные здесь представляют собой амплитуды различных мод, а не амплитуды плоских бегущих волн. Далее эти осцилляторы квантуются, и можно говорить о числе фотонов, соответствующем каждой моде.

§ 3. Основное состояние

Энергия вакуума. Состояние электромагнитного поля с наименьшей возможной энергией, которое мы будем называть основным или вакуумным, — это состояние, в котором у всех осцилляторов все n равны нулю и нет фотонов никаких мод. Это значит, что энергия каждого осциллятора равна $\hbar\omega/2$, где ω — его собственная частота. Если теперь просуммировать эту энергию основного состояния по бесконечному числу всех возможных мод с воз-

растающей частотой (а число мод не ограничено даже для резонатора конечных размеров), то подобная сумма будет расходиться. Мы натолкнулись на первую из трудностей, которые появляются в квантовой электродинамике.

В нашем случае (для вакуумного состояния) эта трудность легко устранима. Предположим, что при измерении энергии мы выбираем различные начала отсчета. Так как постоянная добавка ко всем энергиям не приводит ни к каким физическим эффектам, то произвольный выбор нулевого значения энергии не будет влиять на результаты любого проводимого нами эксперимента. Поэтому мы положим энергию вакуумного состояния равной нулю. Тогда полная энергия произвольного состояния электромагнитного поля определится формулой

$$E = \sum_j n_j \hbar \omega_j, \quad (9.40)$$

где суммирование проводится по всем модам поля. К сожалению, в реальном случае нельзя отсчитывать энергию от совершенно произвольного значения. Энергия эквивалентна массе, а с массой связана гравитация. Даже на свет действуют гравитационные силы (например, луч света отклоняется притяжением Солнца). Следовательно, если закон равенства действия противодействию справедлив хотя бы качественно, то и Солнце должно притягиваться фотонами, а это значит, что с каждым фотоном, энергия которого равна $\hbar\omega$, связано некоторое гравитационное поле. Тогда возникает вопрос: не приводит ли к такому же эффекту и член, соответствующий энергии основного состояния? Физически этот вопрос формулируется так: не образует ли вакуум гравитационного поля, подобного полю массы, распределенной с постоянной плотностью?

Так как большая часть пространства — вакуум, то эффект, обусловленный вакуумной энергией электромагнитного поля, был бы значителен. Мы можем оценить его величину. Предварительно заметим, что в квантовой электродинамике встречается еще одна расходимость, отличная от рассматриваемой и устраняемая при помощи специального предположения, называемого *правилом обрезания*. Согласно этому правилу, моды с очень большими частотами (т. е. с очень малыми длинами волн) должны исключаться из рассмотрения. Мы действительно не знаем, выполняются ли законы электродинамики для длин волн, существенно меньших, чем наблюдаемые в настоящее время. К тому же сейчас есть достаточно оснований полагать, что эти законы нельзя распространить на всю коротковолновую область.

Математические выражения, которые довольно хорошо применимы при больших длинах волн, приводят к расходимостям

в коротковолновой области. Предельные длины доступных нам сейчас волн имеют порядок комптоновской длины волны протона: $\hbar/Mc \approx 2 \cdot 10^{-14}$ см.

Возвращаясь к нашей оценке, допустим, что мы суммируем по всем волновым числам, меньшим некоторого предельного значения $k_{\text{макс}} = Mc/\hbar$. Заменяя приближенно сумму по состояниям на интеграл, получаем плотность энергии вакуумного состояния

$$\frac{E_0}{\text{ед. объема}} = 2 \frac{\hbar c}{2(2\pi)^3} \int_0^{k_{\text{макс}}} k \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{\hbar c k_{\text{макс}}^4}{8\pi^2} \quad (9.41)$$

(заметим, что множитель 2 появился вследствие того, что каждому значению k отвечают две моды соответственно двум возможным поляризациям). Масса, эквивалентная этой энергии, получается делением на c^2 , что дает

$$\frac{m_0}{\text{ед. объема}} = 2 \cdot 10^{15} \text{ г/см}^3. \quad (9.42)$$

Можно было бы ожидать (по крайней мере так кажется на первый взгляд), что при такой плотности гравитационные эффекты велики, чего в действительности не наблюдается. Возможно, что наш расчет слишком упрощенный, и если бы мы использовали все выводы общей теории относительности (такие, например, как гравитационные эффекты, обусловленные большими давлениями, которые здесь подразумеваются), гравитационные эффекты могли бы исчезнуть, однако все это никем еще не проделано. Возможно, найдется такое правило обрезания, которое не только даст конечную плотность энергии вакуумного состояния, но и позволит сделать это релятивистски-инвариантным образом. Сейчас совершенно не ясно, к чему все это приведет.

Поэтому будем пока просто считать плотность энергии вакуумного состояния равной нулю. До сих пор не было ни одного эксперимента, который противоречил бы такому допущению. При дальнейшем изучении квантовой электродинамики нам встретятся интегралы с расходимостями других типов, причем устранение будет значительно сложнее.

Волновая функция вакуумного состояния. Волновая функция совокупности осцилляторов представляется в виде произведения всех волновых функций всех мод. Волновая функция основного состояния осциллятора, соответствующего фотону с поляризацией 1 и волновым числом $\mathbf{k}$, пропорциональна экспоненте $\exp[-(ck/2\hbar)/a_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{k}}]$. Поэтому с точностью до нормировочной постоянной волновая функция основного, или вакуумного, состоя-

ния всей системы равна

$$\Phi_0 = \exp \left[- \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar c}{2\hbar} (a_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{k}} + a_{2\mathbf{k}}^* a_{2\mathbf{k}}) \right]. \quad (9.43)$$

Задача 9.6. Покажите, используя синусоидальные и косинусоидальные моды с действительными переменными, что последнее выражение, в которое входят комплексные переменные, действительно является справедливым (ср. задачу 8.4).

Задача 9.7. Покажите, что для вакуумного состояния среднее значение величины $a_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{l}}$ равно $(\hbar/2kc)\delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}}$. Выведите формулу для среднего значения величины $(a_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{k}})^r$, где r — целое число, и укажите, как, пользуясь этой формулой, получить среднее значение произведения $(a_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{k}})^r (a_{1\mathbf{p}}^* a_{1\mathbf{p}})^s$ при $\mathbf{p} \neq \mathbf{k}$. Покажите, что среднее значение величины $(a_{1\mathbf{k}})^2$ или $(a_{1\mathbf{k}}^*)^2$ и среднее значение произведения любого нечетного числа величин a равны нулю. Покажите также, каким образом можно вычислить для вакуумного состояния ожидаемое значение любого произведения величин a или a^* .

Задача 9.8. Если состояние определяется единственным фотоном, который находится в состоянии $1\mathbf{k}$, все множители в волновой функции имеют вид Φ_0 , за исключением одного, равного Φ_1 . Для осциллятора при этом выполняется равенство $\Phi_1(q) = q\Phi_0(q)$. Волновая функция, представляющая возбужденную волну, записывается в виде линейной комбинации: 1) волновой функции состояния с возбужденной косинусоидальной модой и 2) умноженной на i волновой функции состояния с возбужденной синусоидальной модой. Используя это, покажите, что волновая функция однофотонного состояния $1\mathbf{k}$ имеет вид $a_{1\mathbf{k}}^* \Phi_0$. Она не нормирована. Квадрат нормировочной постоянной $\int \Phi_0^* a_{1\mathbf{k}} a_{1\mathbf{k}}^* \Phi_0$ (или ожидаемое значение величины $a_{1\mathbf{k}} a_{1\mathbf{k}}^*$ для вакуума), как мы видели в предыдущей задаче, есть $\hbar/2kc$. Отсюда следует, что нормированная волновая функция однофотонного состояния представляется в виде $\sqrt{2kc/\hbar} a_{1\mathbf{k}}^* \Phi_0$.

§ 4. Взаимодействие поля с веществом

С формальной точки зрения взаимодействие поля излучения с веществом рассмотреть совсем не трудно. Функция действия, представленная формулами (9.30), (9.31) и (9.33), очевидно, соответствует взаимодействию материальной системы с осцилляторами поля излучения, и в этом случае амплитуду следует искать с по-

мощью такого соотношения:

$$\text{амплитуда} = \int \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_{\text{част}} + S_{\text{взаим}} + S_{\text{поле}}) \right] \right\} \prod_{i, k} \mathcal{D}q_i \mathcal{D}a_{1k} \mathcal{D}a_{2k}. \quad (9.44)$$

Интегрирование по координатам осцилляторов поля излучения может быть выполнено сразу же, так как все они входят в выражение (9.44) лишь квадратичным образом. Это интегрирование и будет сделано далее.

Излучение атома. Одна из трудностей рассматриваемой проблемы заключается в громоздкости выражений, что обусловлено большим числом координат и импульсов. Поэтому, чтобы уяснить суть дела, начнем с простого случая. Будем решать задачу о вероятности излучения света отдельным атомом, применяя теорию возмущений (предполагается, что взаимодействие света и вещества, которому соответствует $S_{\text{взаим}}$, мало и разложение ведется только до членов первого порядка малости).

Если пренебречь функцией действия $S_{\text{взаим}}$, то поле излучения и вещество можно рассматривать как независимые системы. Допустим, что состояния свободного атома с волновыми функциями $\Psi_N(\mathbf{q})$ имеют энергии e_N , где $N = 0, 1, 2 \dots$, а символом $\mathbf{q}$ обозначены радиусы-векторы $\mathbf{q}_i$ всех частиц атома. Состояние поля излучения можно определить заданием всех целочисленных значений n_{1k} и n_{2k} .

Энергетические уровни полной системы (излучение плюс вещество при отсутствии взаимодействия между ними) равны

$$E = e_N + \sum_k (n_{1k} + n_{2k}) \hbar k c. \quad (9.45)$$

Волновая функция этого состояния записывается в виде произведения

$$\Psi = \psi_N(\mathbf{q}) \Phi(n_{1k}, n_{2k}), \quad (9.46)$$

где $\Phi(n_{1k}, n_{2k})$ — волновая функция поля излучения (произведение волновых функций гармонических осцилляторов).

Чтобы рассмотреть излучение фотона атомом, выберем такое начальное состояние, когда атом находится на некотором уровне M , а внешних фотонов нет совсем (все числа n_{1k} и n_{2k} равны нулю). Соответствующая волновая функция равна

$$\Psi_i = \psi_M(\mathbf{q}) \Phi_0, \quad (9.47)$$

где Φ_0 берется в виде (9.43). В конечном состоянии атом находится на другом уровне N и, кроме того, имеется один фотон, скажем, с импульсом $\mathbf{l}$ и поляризацией $\mathbf{l}$. В соответствии с задачей 9.8

волновая функция поля излучения имеет вид $a_{1l}^* \Phi_0$, поэтому волновая функция конечного состояния всей системы есть

$$\Psi_f = \sqrt{\frac{2lc}{\hbar}} \Psi_N(\mathbf{q}) a_{1l}^* \Phi_0. \quad (9.48)$$

Чтобы найти вероятность перехода за единицу времени (с точностью первого порядка), необходимо в соответствии с формулой (6.79) вычислить матричный элемент V_{fi} возмущающего потенциала между этими состояниями. Функция действия для возмущения определяется формулой (9.32), а соответствующий ей потенциал имеет вид

$$V = \sqrt{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} (a_{1\mathbf{k}}^* j_{1\mathbf{k}} + a_{1\mathbf{k}} j_{1\mathbf{k}}^*), \quad (9.49)$$

где, как и в задаче 9.2, ток $j_{1\mathbf{k}}$ зависит от переменных, связанных с атомом. Этот матричный элемент равен

$$V_{fi} = \int \Psi_N^* \Phi_0^* \sqrt{\frac{2lc}{\hbar}} a_{1l} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{4\pi} (a_{1\mathbf{k}}^* j_{1\mathbf{k}} + a_{1\mathbf{k}} j_{1\mathbf{k}}^*) \Psi_M \Phi_0 d\mathbf{q} \prod_{\mathbf{k}} da_{1\mathbf{k}}, \quad (9.50)$$

или, в другом виде,

$$\begin{aligned} V_{fi} = & \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{8\pi lc}{\hbar}} \int \Phi_0^* a_{1l} a_{1\mathbf{k}}^* \Phi_0 \prod_{\mathbf{k}} da_{1\mathbf{k}} \int \Psi_N^* j_{1\mathbf{k}} \Psi_M d\mathbf{q} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \int \sqrt{\frac{8\pi lc}{\hbar}} \Phi_0^* a_{1l} a_{1\mathbf{k}} \Phi_0 \prod_{\mathbf{k}} da_{1\mathbf{k}} \int \Psi_N^* j_{1\mathbf{k}}^* \Psi_M d\mathbf{q}, \end{aligned} \quad (9.51)$$

так как от координат $\mathbf{q}$ здесь зависит только ток $\mathbf{j}$. Ожидаемые значения произведения величин $\mathbf{a}$ для вакуумного состояния рассматривались в задаче 9.7, где было, в частности, установлено, что интеграл

$$\int \Phi_0^* a_{1l} a_{1\mathbf{k}}^* \Phi_0 \prod_{\mathbf{k}} da_{1\mathbf{k}} = 0$$

есть нуль во всех случаях, за исключением одного, а именно при $k = l$, когда он равен $\hbar/2lc$. Обозначим матричный элемент $\int \Psi_N^* \mathbf{j} \Psi_M d\mathbf{q}$ как $(\mathbf{j})_{NM}$. Тогда матричный элемент V_{fi} запишется в виде $\sqrt{2\pi\hbar/lc} (f_{1l})_{NM}$. Вероятность перехода за единицу времени при этом равна [ср. формулу (6.94)]

$$\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \left(\frac{2\pi\hbar}{lc}\right) |j_{1l}|_{NM}^2 \delta(E_M - E_N - \hbar lc). \quad (9.52)$$

Обычно мы не задаемся вопросом об излучении какого-либо определенного фотона, а хотим вместо этого найти вероятность излучения произвольного фотона (с поляризацией 1) в некоторый малый телесный угол $d\Omega$. Для этого необходимо просуммировать 1 по всем значениям, соответствующим этому направлению. Число значений 1 в единице объема есть $d^3l/(2\pi)^3$; если направление 1 задано, то мы должны взять интеграл по dl , записав $d^3l/(2\pi)^3$ в виде $l^2 dl d\Omega/(2\pi)^3$. Таким образом, вероятность перехода за единицу времени (1 сек) получим в виде

$$\frac{dP}{dt} = \int \frac{(2\pi)^2}{lc} |j_{1l}|_{NM}^2 \delta(E_M - E_N - \hbar lc) l^2 \frac{dl d\Omega}{(2\pi)^3}. \quad (9.53)$$

Интегрирование по l дает выражение

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3} |j_{1l}|_{NM}^2 d\Omega, \quad (9.54)$$

характеризующее вероятность излучения света с поляризацией 1 по направлению 1 в телесный угол $d\Omega$. Частота излучаемого света

$$\omega = lc = \frac{E_M - E_N}{\hbar}. \quad (9.55)$$

Задача 9.9. Для сложной системы в нерелятивистском случае имеем

$$(j_{1k})_{NM} = \sum_b (e_b \mathbf{e} \cdot \dot{\mathbf{q}}_b e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}_b})_{NM}, \quad (9.56)$$

где $\mathbf{e}$ — единичный вектор в направлении поляризации света, e_b и $\mathbf{q}_b$ — заряд и радиус-вектор частицы b . Допустим, что длина волны света много больше размеров атома, т. е. квадрат модуля волновой функции, описывающей положение электрона b , спадает до нуля на расстояниях, много меньшем чем $1/k$. Покажите, что при этом экспоненту $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}_b/\hbar}$ можно аппроксимировать единицей и записать матричный элемент как

$$j_{1k, NM} = i\omega \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\mu}_{NM}, \quad (9.57)$$

где

$$\boldsymbol{\mu}_{NM} = \sum_b (e_b \mathbf{q}_b)_{NM}. \quad (9.58)$$

Функция $\boldsymbol{\mu}_{NM}$ называется *матричным элементом электрического дипольного момента атома*, а приближение, использованное при выводе соотношения (9.57), называется *дипольным приближением*. Покажите, что полная вероятность излучения света в произвольном направлении за единицу времени равна

$$\frac{dP}{dt} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\boldsymbol{\mu}_{NM}|^2. \quad (9.59)$$

[Для этого нужно проинтегрировать выражение (9.54) по всем направлениям с учетом того, что векторы $\mathbf{e}$ и $\mathbf{k}$ перпендикулярны и что существуют два возможных направления поляризации.]

Исключение переменных электромагнитного поля. Поле излучения представляется квадратичным функционалом действия, поэтому возникает возможность провести интегрирование по всем переменным электромагнитного поля. Именно это мы здесь и сделаем. Нам нужно выполнить интегрирование по всем переменным $a_{1\mathbf{k}}$ и $a_{2\mathbf{k}}$ в выражении (9.44). Для этого нужно еще задать начальное и конечное состояния поля излучения. Сначала выберем наиболее простой случай, считая, что в обоих случаях мы имеем состояние вакуума и все осцилляторы поля излучения переходят из состояний с нулевым числом фотонов в такие же состояния. Амплитуду перехода при этом можно записать как

$$\text{амплитуда} = \int e^{(i/\hbar)S_{\text{част}}} X[q] \mathcal{D}q, \quad (9.60)$$

где

$$X[q] = \int e^{(i/\hbar)(S_{\text{взаим}} + S_{\text{поле}})} \prod_{\mathbf{k}} da_{1\mathbf{k}} da_{2\mathbf{k}} \quad (9.61)$$

— функционал от переменных q , которые входят в первую часть равенства через токи j . Так как действие представляется в виде суммы вкладов от каждой моды $\sum_{\mathbf{k}} (S_{1\mathbf{k}} + S_{2\mathbf{k}})$, где

$$S = \int \left[\sqrt{4\pi} (ja^* + j^*a) + \frac{1}{2} \dot{a}^* \dot{a} - \frac{k^2 c^2}{2} a^* a - \frac{\hbar k c}{2} \right] dt, \quad (9.62)$$

то ясно, что функционал X представляет собой произведение соответствующих сомножителей. Интеграл для произвольной моды можно записать как

$$\begin{aligned} X_{1\mathbf{k}} &= \int \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int \left(\sqrt{4\pi} j_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{k}} + \sqrt{4\pi} j_{1\mathbf{k}} a_{1\mathbf{k}}^* + \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2} \dot{a}_{1\mathbf{k}}^* \dot{a}_{1\mathbf{k}} - \frac{k^2 c^2}{2} a_{1\mathbf{k}}^* a_{1\mathbf{k}} - \frac{\hbar k c}{2} \right) dt \right] \right\} \mathcal{D}a_{1\mathbf{k}} = \\ &= \exp \left[-\frac{4\pi}{2\hbar} \int j_{1\mathbf{k}}(t) j_{1\mathbf{k}}^*(s) \frac{1}{2kc} e^{-ikc|t-s|} dt ds \right]. \end{aligned} \quad (9.63)$$

С таким типом интегралов по траекториям мы уже неоднократно встречались, если не считать некоторого усложнения, обусловленного комплексным характером переменных, от которых сначала нужно перейти к действительным переменным. Интеграл точно такого же типа рассматривался в § 9 гл. 8 с той лишь разницей, что функция $\gamma(t)$ в формуле (8.136) теперь заменяется на

$\gamma = \sqrt{4\pi} j_{1k}$ и ω равно $k c$; тогда окончательное выражение (9.63) совпадает с формулой (8.138). Произведение интегралов типа (9.63) для всех k и обеих поляризаций дает функционал $X = \exp(iI/\hbar)$, где

$$I = \frac{1}{2} \sum_k \int [j_{1k}(t) j_{1k}^*(s) + j_{2k}(t) j_{2k}^*(s)] \frac{4\pi}{2kc} e^{-ikc|t-s|} dt ds. \quad (9.64)$$

Таким образом, вопрос о переходе вакуума в вакуум полностью решается методом интегрирования лишь по траекториям переменных, относящихся к веществу:

$$\text{амплитуда} = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_{\text{част}} + I) \right] \mathcal{D}q(t). \quad (9.65)$$

Обсудим ряд следствий, вытекающих из этого результата (случай, когда начальное или конечное состояние отлично от вакуумного, разбирается в гл. 10).

Основной вывод имеет простой смысл: функцией действия для вещества является не $S_{\text{част}}$, а модифицированная функция $S'_{\text{част}} = S_{\text{част}} + I$. Это изменение обусловлено взаимодействием вещества с электромагнитным полем.

Такое толкование не является строго классическим, так как функция действия I — комплексная. Можно показать, что законы классической физики, которые получаются из принципа наименьшего действия при использовании только действительной части $S'_{\text{част}}$, в точности совпадают с комбинацией уравнений Максвелла и законов Ньютона. Однако при этом никак не учитывается то обстоятельство, что решения уравнений Максвелла берутся только в виде запаздывающих волн (в самом деле, условие выбора запаздывающих волн нельзя выразить с помощью принципа наименьшего действия, если действие выражается только через координаты частиц; такая функция действия соответствует полусумме опережающего и запаздывающего решений [6]).

Займемся теперь исследованием нашего полного квантовомеханического комплексного выражения для I , в котором учитывается условие запаздывания.

Первое приближение теории возмущений. Точное вычисление интеграла по q является слишком сложной задачей, поэтому воспользуемся тем, что в выражениях для токов в действии I входит электрический заряд частиц e . Действие I пропорционально e^2 или в безразмерной форме — постоянной тонкой структуры

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,039}$$

— весьма малой величине, точное значение которой берется из опыта. Можно ожидать, что эффекты, обусловленные действием I , малы. Мы уже знаем, что, например, значения атомных уровней теория Шредингера дает вполне точно, поэтому здесь могут быть лишь малые ошибки, возникающие из-за пренебрежения действием I .

Рассмотрим эффекты, обусловленные действием I , в первом порядке по e^2 , соответственно — во втором порядке по e , используя первоначальное выражение действия в виде (9.32). Введем λ_{MM} — амплитуду вероятности перехода материальной системы из начального состояния M в такое же конечное состояние подобно тому, как это делалось в § 5 гл. 6. Если пренебречь вкладом от I , то в нулевом порядке будем иметь

$$\lambda_{MM0} = e^{-(i/\hbar) E_M t}. \quad (9.66)$$

Член первого порядка

$$\begin{aligned} \lambda_{MM1} &= \frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \psi_M^*(q_f) e^{(i/\hbar) S_{\text{част}}} I \psi_M(q_i) \mathcal{D}q(t) = \\ &= -\frac{1}{2\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \int \psi_M^*(q_f) e^{(i/\hbar) S_{\text{част}}} \int [j_{1\mathbf{k}}^*(t) j_{1\mathbf{k}}(s) + \\ &+ j_{2\mathbf{k}}^*(t) j_{2\mathbf{k}}(s)] \frac{4\pi}{2kc} e^{-ikc|t-s|} dt ds \psi_M(q_i) \mathcal{D}q(t). \end{aligned} \quad (9.67)$$

Будем считать, что $t > s$; это дает коэффициент, равный двум. Аналогичное выражение уже вычислялось в § 1 гл. 5. Для данного случая получаем

$$\lambda_{MM1} = -\frac{i}{\hbar} (\Delta E) T e^{-iE_M T/\hbar},$$

где

$$\begin{aligned} \Delta E &= i \sum_N \sum_{\mathbf{k}} \frac{4\pi}{2kc} [(j_{1\mathbf{k}}^*)_{MN} (j_{1\mathbf{k}})_{NM} + (j_{2\mathbf{k}}^*)_{MN} (j_{2\mathbf{k}})_{NM}] \times \\ &\times \int_0^\infty e^{(i/\hbar) (E_M - E_N - \hbar kc) \tau} d\tau = \sum_N 4\pi\hbar \int [|(j_{\mathbf{k}})_{NM}|^2 + \\ &+ |(j_{2\mathbf{k}})_{NM}|^2] [2kc (E_M - E_N - \hbar kc + i\varepsilon)]^{-1} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (9.68)$$

Выделив в этом выражении действительную и мнимую части, можно записать его в виде

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

Действительная часть δE соответствует малому сдвигу энергетических уровней, впервые экспериментально обнаруженному Лэмбом и Ризерфордом — так называемому лэмбовскому сдвигу. Этот сдвиг составляет

$$\delta E = \sum_N \int | (j_{1k})_{NM} |^2 + \\ + | (j_{2k})_{NM} |^2] P. P. (E_M - E_N - \hbar k c)^{-1} \frac{4\pi\hbar}{2kc} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} . \quad (9.69)$$

Мнимая часть ΔE имеет вид

$$\frac{\hbar\gamma}{2} = \sum_N \int | (j_{1k})_{NM} |^2 + \\ + | (j_{2k})_{NM} |^2] \pi \delta (E_M - E_N - \hbar k c) \frac{4\pi\hbar}{2kc} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} . \quad (9.70)$$

Амплитуда вероятности того, что атом остается в возбужденном состоянии и не испускает фотонов, записывается теперь как $\exp [-i (E_m + \delta E - i\gamma/2)T/\hbar]$ и соответствующая вероятность равна $\exp (-\gamma T)$. Таким образом, вероятность того, что атом остается в состоянии M , экспоненциально уменьшается в зависимости от величины декремента затухания γ .

Физически это уменьшение вероятности объясняется тем, что атом в состоянии M может испустить фотон и перейти в более низкое состояние N . Сравнивая выражения (9.53) и (9.70), мы убеждаемся, что γ действительно есть полная вероятность перехода за единицу времени из состояния M во все нижележащие состояния N .

§ 5. Электрон в поле излучения

Поправка к энергии. Чтобы лучше понять смысл электромагнитной поправки к энергии, рассмотрим очень простой пример: систему, состоящую всего лишь из одного движущегося заряда, положение которого характеризуется вектором $\mathbf{R}$ (например, атом водорода с бесконечно тяжелым ядром или свободный электрон в пустом пространстве). Тогда ток $\mathbf{j} = e\dot{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}/\hbar)$.

В данном случае ток $\mathbf{j}$ содержит $\dot{\mathbf{R}}$, поэтому в соответствии с § 3 гл. 7 при рассмотрении членов второго порядка малости нам следует проявить некоторую осторожность. Поправка к энергии δE содержит дополнительный член, связанный с квадратом скорости $\dot{\mathbf{R}}^2$. Выражая $\dot{\mathbf{R}}$ (подобно тому, как это делалось в § 5

гл. 7) через оператор импульса $\mathbf{p}$, получаем

$$\delta E_1 = \sum_N \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2kc(2\pi)^3} (|\mathbf{p}_1 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|_{NM}^2 + \\ + |\mathbf{p}_2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|_{NM}^2) \frac{4\pi e^2 \hbar}{m^2(E_M - E_N - \hbar kc)} + \frac{4\pi e^2}{m} \int \frac{\hbar}{2kc} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (9.71)$$

Задача 9.10. Почему нет необходимости точно вычислять в матричных элементах экспоненту $^{1/2} [\mathbf{p}_1 \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}/\hbar) + \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}/\hbar) \mathbf{p}_1]$?

Рассмотрим теперь простейший случай покоящегося свободного электрона. В этом случае поправка к энергии, связанная с полем, в любом состоянии представляет собой поправку к энергии покоя, или, как это следует из теории относительности, — к массе $\delta m = \delta E_R/c^2$. Это и есть так называемая *электромагнитная масса электрона*. Состояния покоящейся свободной частицы описываются плоскими волнами. Если M и N — импульсы электрона соответственно в состояниях $\mathbf{p}_M$ и $\mathbf{p}_N$, то матричный элемент $[\mathbf{p}_1 \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}/\hbar)]_{NM}$ всегда равен нулю, за исключением случая $\mathbf{p}_N = \mathbf{p}_M - \mathbf{k}$, где он равен $\mathbf{p}_{1N}$. Поэтому матричный элемент, соответствующий первоначально покоившемуся электрону, равен нулю, а поправка δE_R здесь есть не что иное, как последний расходящийся интеграл в выражении (9.71).

Затруднения с короткими волнами. Однако это еще не все. Когда мы выделяли в S_c член, содержащий $\rho_k \rho_k / 2k^2$, уже указывалось, что этот член соответствует взаимодействию точечных зарядов $^{1/2} \sum_{i,j} e_i e_j |q_i - q_j|^{-1}$, однако не было отмечено, что при этом в сумму должны включаться также и расходящиеся члены с $i = j$. Действительно, для отдельной частицы $\rho_k = e \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q})$, поэтому $^{1/2} |\rho_k|^2 / k^2 = 4\pi e^2 / 2k^2$ и в выражение S_c войдет интеграл $4\pi e^2 \int (1/2k^2) d^3k / (2\pi)^3$. Здесь и выше в δE_R расходимости не сокращаются, и мы встречаемся с серьезной трудностью: интегралы по импульсу k оказываются квадратично расходящимися, квантовая электродинамика дает бессмысленный результат.

Правда, наше рассмотрение заряженной частицы было нерелятивистским. Однако релятивистское рассмотрение вещества (квантовая электродинамика при этом не изменяется) не избавляет нас от расходящихся результатов, хотя порядок расходимости может при этом измениться.

Для частицы с нулевым спином, подобной π -мезону, степень расходимости не изменяется и по-прежнему остается квадратичной. Здесь, однако, мы имеем возможность определить экспериментальное значение поправки к массе. Насколько известно,

заряженный и нейтральный π -мезоны различаются только зарядом, т. е. по-разному взаимодействуют с электромагнитным полем, оставаясь неразличимыми при всех других взаимодействиях. Поэтому можно предполагать, что различие масс заряженного и нейтрального π -мезонов (их массы равны соответственно $m_\pi = 273,2$ и $264,2$ электронных масс), составляющее $9,0$ электронных масс, равно $0,034 m_\pi = 4,6 M_{\text{эв}}$, т. е. равно энергии, заключенной в электромагнитном поле.

Ограничим верхние пределы интегрирования в расходящихся интегралах некоторым импульсом $k_{\text{макс}}$ (такая операция, к сожалению, релятивистски неинвариантна). Тогда последний член соотношения (9.71), который в случае $\hbar k_{\text{макс}}/c \gg m_\pi$ значительно превосходит два других, даст значение энергии, равное $e^2 (k_{\text{макс}})^2 / 2\pi m_\pi c$. Если это значение приравнять величине $m_{\pi\pm} - m_{\pi^0} = 0,034 m_\pi c^2$, т. е. положить $(e^2 / 2\pi \hbar c) (\hbar k_{\text{макс}} / m_\pi c)^2 = 0,034$, то для $k_{\text{макс}}$ получим оценку

$$k_{\text{макс}} \approx \frac{5,4 m_\pi c}{\hbar} \approx \frac{0,8 M c}{\hbar},$$

где M — масса протона. (Релятивистская теория дает $\Delta E = 0,034 m_\pi$ при обрезании приблизительно на том же значении $k_{\text{макс}}$). Именно поэтому мы считаем, что наши сегодняшние представления о квантовой электродинамике (или о «частицах», с которыми взаимодействуют фотоны) весьма неудовлетворительны. Затруднения появляются, когда мы имеем дело с энергиями, большими массы протона, или с соответствующими величинами частот и волновых чисел. Эти трудности связаны с собственными колебаниями, длина волны λ которых меньше чем 10^{-14} см.

Согласно теории Дирака, электрон, спин которого равен $1/2$, должен обладать определенным магнитным моментом. Оказывается, что такому магнитному моменту соответствует отрицательная магнитная энергия, которая почти полностью компенсирует положительную электрическую энергию. Разность этих энергий, как и раньше, расходится, однако теперь только логарифмически. Если в соответствующих интегралах провести обрезание тех же длин волн, что и выше, то поправка к массе электрона составит всего лишь около 3%, однако этого сейчас никак нельзя проверить, так как электрон не имеет нейтрального партнера.

Аномальный магнитный момент протона так велик, что его магнитная энергия превышает электрическую и поправка может стать отрицательной. Нейтрон также имеет магнитный момент, поэтому поправка для него тоже отрицательна. Однако магнитный момент протона больше, и именно этим можно объяснить тот факт, что нейтрон тяжелее протона. Если расходящиеся интегралы

обрезать на величине энергии порядка протонной массы, получается правильное значение разности масс протона и нейтрона, несмотря на очень грубый способ вычисления этой точно измеренной величины $\Delta M = 782,71 \pm 0,40$ кэв [25]. Массовые различия между различными частицами — протоном и нейтроном, заряженным и нейтральным пионами, положительным, нейтральным и отрицательным Σ -гиперонами и т. д. — бросают серьезный вызов современной физике ¹⁾ и, возможно, указывают на недостаточность квантовой электродинамики как полной теории, описывающей электромагнитные явления. Мы не знаем, что на самом деле ошибочно: квантовая электродинамика или наше предположение о распределении заряда внутри частиц. Только когда у нас будет завершенная полная теория частиц и их взаимодействий, мы сможем выяснить ограничения нашей теперешней теории квантовой электродинамики (или, во всяком случае, некоторые из них).

§ 6. Лэмбовский сдвиг

В соответствии с уравнением Шредингера второй уровень атома водорода является вырожденным. Энергии уровней $2p$ и $2s$ имеют одинаковое значение. Из уравнения Дирака также следует вырождение уровней $2p_{1/2}$ и $2s_{1/2}$. В 1946 г. Лэмб и Ризерфорд обнаружили, что в действительности наблюдается небольшое дополнительное расщепление, относительная величина которого равна приблизительно $3 \cdot 10^6$, вследствие чего уровень $2s_{1/2}$ оказывается сдвинутым вверх на $1057,1$ Мгц. Теоретики предсказывали, что такая разность энергий может возникать из-за эффектов, обусловленных членом I , однако вплоть до работы Бете и Вайскопфа в 1947 г. бесконечности в расходящихся интегралах сводили на нет все попытки вычислить эту разность. Бете и Вайскопф рассуждали следующим образом.

Прежде всего, поскольку

$$\frac{1}{E_M - E_N - \hbar k c} = \frac{1}{\hbar k c} \frac{E_M - E_N}{E_M - E_N - \hbar k c} - \frac{1}{\hbar k c}, \quad (9.72)$$

энергия (9.71) представляет собой сумму трех членов:

$$\delta E = \delta E' + \delta E'' + \delta E''', \quad (9.73)$$

¹⁾ Разработанная недавно теория SU_3 - и SU_6 -симметрий позволяет вычислить разности масс сильно взаимодействующих частиц (мезонов и барионов) не только для заряженных и нейтральных партнеров, но и для таких, казалось бы, совершенно различных частиц, как нуклон и Σ -гиперон или π - и k -мезоны. (Подробнее см., например, монографию: В. С. Барашенко в, Сечения взаимодействия элементарных частиц, М., 1966.) — Прим. ред.

где

$$\delta E' = \frac{2\pi e^2}{m^2 c^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3 k^2} \sum_N \frac{(E_M - E_N)(|p_1 e^{-ik \cdot R}|_{NM}^2 + |p_2 e^{-ik \cdot R}|_{NM}^2)}{E_M - E_N - \hbar k c}, \quad (9.74)$$

$$\delta E'' = -\frac{2\pi e^2}{m^2 c^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3 k^2} \sum_N (|p_1 e^{-ik \cdot R}|_{NM}^2 + |p_2 e^{-ik \cdot R}|_{NM}^2), \quad (9.75)$$

$$\delta E''' = \frac{2\pi e^2 \hbar}{mc} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3 k}. \quad (9.76)$$

Член $\delta E'''$ и бесконечность, связанная с кулоновским членом δE_c , не зависят от состояния электрона. Они будут (мы надеемся на это) конечными в будущей теории. К массе покоя электронов эти члены дают поправку δm . Если m_0 — механическая масса (т. е. масса неэлектромагнитного происхождения), то реально наблюдаемая экспериментальная масса $m = m_0 + \delta m$, где $\delta m c^2 = \delta E''' + \delta E_c$.

Такую поправку к энергии покоя, составляющей часть полной энергии атома водорода, можно было, конечно, ожидать заранее, однако мы учитываем ее автоматически, если все энергии связи измеряются относительно энергии полностью ионизованного состояния, когда все частицы свободны. Поправка δm относится к покоящемуся электрону, и она совершенно не зависит от его движения или от каких-либо характеристик состояния, в котором находится этот электрон.

Выражение для $\delta E''$ можно вычислить из суммы по N , которая в соответствии с правилами матричного умножения дает выражение $(p_1^2 + p_2^2)_{MM}$. После интегрирования по всем направлениям вектора $\mathbf{k}$ отсюда получается член $\frac{2}{3} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{p})_{MM}$ и, следовательно,

$$\delta E'' = -\frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{p})_{MM}}{2m} \frac{8\pi e^2}{3mc^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3 k^2}. \quad (9.77)$$

Опять-таки можно надеяться, что когда-нибудь это выражение удастся сделать сходящимся. Такая добавка к энергии существует уже в случае свободного электрона. Интерпретируется она следующим образом: если меняется масса, то выражение для кинетической энергии $p^2/2m_0$ следовало бы заменить выражением

$$\frac{p^2}{2m} \approx \frac{p^2}{2m_0} \left(1 - \frac{\delta m}{m_0}\right), \quad (9.78)$$

а член $\delta E'''$ как раз должен соответствовать добавке $-(p^2/2m_0)\delta m$. Однако мы уже учитывали этот член, когда с помощью уравнения Шредингера вычисляли значения энергетических уровней и использовали выражение $p^2/2m$ с экспериментально наблюдаемой массой

m. Поправка $\delta E''$ однозначно отождествляется с добавкой к кинетической энергии, поскольку она является единственной поправкой для движущегося свободного электрона и пропорциональна кинетической энергии ¹⁾. Наконец, если даже интерпретация этих поправок является неверной, то при вычислении разности энергий для состояний $2s$ и $2p$ эти поправки выпадают, так как значения $\delta E'''$ и δE_c одинаковы для всех состояний; одинаковыми являются и значения $\delta E''$, поскольку для состояний $2s$ и $2p$ матричный элемент $(p^2/2m)_{mm}$ один и тот же.

При вычислении поправки $\delta E'$ предполагалось вполне оправданным дипольное приближение. В этом случае матричные элементы не зависят от $\mathbf{k}$, и, вычислив интеграл

$$\int \frac{d^3\mathbf{k}}{k^2} \frac{1}{E_M - E_N - \hbar k c} = \frac{4\pi}{\hbar c} \ln \frac{\hbar k_{\max} c}{E_M - E_N}, \quad (9.79)$$

мы получим

$$\delta E' = \frac{e^2}{\pi m^2 \hbar c^3} \sum_M \left[\ln \left(\frac{\hbar k_{\max} c}{E_M - E_N} \right) \right] (E_M - E_N) \frac{2}{3} |\mathbf{p}_{NM}|^2. \quad (9.80)$$

Поскольку для атома водорода известны состояния и матричные элементы, по которым проводится суммирование в (9.80), то сумма может быть вычислена и неясным остается лишь вопрос о выборе значения $\hbar k_{\max} c$. Бете обосновал свой выбор этого параметра тем, что нерелятивистское приближение становится несправедливым в области больших значений k , и если проделать последовательно релятивистские вычисления, то значение $\hbar k_{\max} c$ оказалось бы, по-видимому, порядка mc^2 . Выбор значения $\hbar k_{\max} c = mc^2$ дал для сдвига $2s_{1/2}$ - и $2p_{1/2}$ -уровней величину, равную приблизительно 1000 Мгц , так что Бете мог рассчитывать, что он находится на правильном пути.

Оставалось еще сделать релятивистский расчет, используя дираковские волновую функцию и состояния. Только на этом пути можно было дать точное определение величины $k_{\max}$. Однако это оказалось совсем не простым делом, так как возникали трудности с идентификацией различных расходящихся членов. Если применить к этим членам процедуру обрезания при некотором максимальном значении импульса и иметь дело с полученными

¹⁾ Значение δm , которое следует из формулы (9.77), равно $(8\pi e^2/3c^2) \int d^3k/k^2$ и не совпадает со значением δm из выражения $\delta E/c^2$, соответствующего неподвижному электрону. Это происходит потому, что мы ограничиваемся нерелятивистским приближением. Если провести полностью релятивистское рассмотрение, то оба способа вычисления дают одно и то же значение δm .

таким образом конечными величинами, то и тогда ситуация не проясняется, так как такая процедура не является релятивистски-инвариантной вследствие того, что с импульсом и энергией мы обращаемся здесь по-разному. (Одно следствие этого обстоятельства уже отмечалось нами в примечании на стр. 280.) Метод, устраняющий эти затруднения, был развит Швингером, который показал, как можно в явном виде сохранить релятивистскую инвариантность на протяжении всего расчета и одновременно идентифицировать все бесконечные члены. Другой метод, разработанный Фейнманом, сводился к релятивистски инвариантной процедуре обрезания бесконечных интегралов. Рассмотрим этот метод подробнее.

Полный эффект от действия электромагнитного поля, которое на этот раз включает в себя и кулоновское взаимодействие, учитывается дополнительным членом $I + S_c$ в функции действия. Релятивистская инвариантность функции I , представленной в форме, подобной (9.64), далеко не очевидна, так как в эту формулу входят переменные $\mathbf{k}$ и t , а не $\mathbf{R}$ и t или $\mathbf{k}$ и ω . Выразим функцию I , используя в качестве переменных частоту ω и волновое число $\mathbf{k}$. Для этого прежде всего заметим, что интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikc|\tau|} e^{-i\omega\tau} d\tau = \frac{2ikc}{\omega^2 - k^2c^2 + i\varepsilon}, \quad (9.81)$$

или

$$e^{-ik|t-s|c} = \int \frac{2ikc d\omega/2\pi}{\omega^2 - k^2c^2 + i\varepsilon}. \quad (9.82)$$

Если определить

$$j(\mathbf{k}, \omega) = \int j_{\mathbf{k}}(t) e^{+i\omega t} dt = \int \int j(\mathbf{R}, t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \omega t)} d^3\mathbf{R} dt, \quad (9.83)$$

то функция I запишется в виде

$$I = -2\pi \int \frac{|j_1(\mathbf{k}, \omega)|^2 + |j_2(\mathbf{k}, \omega)|^2}{\omega^2 - k^2c^2 + i\varepsilon} \frac{d^3\mathbf{k} d\omega}{(2\pi)^4}. \quad (9.84)$$

Релятивистская симметрия этого выражения относительно переменных ω и $\mathbf{k}$ вполне очевидна, так как выражение $\omega^2 - k^2c^2$ — инвариант по отношению к преобразованиям Лоренца. Однако токи входят в выражение (9.84) релятивистски несимметрично.

Нам была бы нужна релятивистски-инвариантная комбинация типа $c^2\rho^2 - \mathbf{j} \cdot \mathbf{j}$, так как величины ρc и $\mathbf{j}$ образуют четырехмерный вектор. Чтобы получить такую комбинацию, положим

$$\rho(\mathbf{k}, \omega) = \int \rho_{\mathbf{k}}(t) e^{+i\omega t} dt = \int \int \rho(\mathbf{R}, t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \omega t)} d^3\mathbf{R} dt; \quad (9.85)$$

тогда часть функции действия, соответствующая кулоновскому взаимодействию, запишется в виде

$$S_c = \int \frac{|\rho(\mathbf{k}, \omega)|^2}{k^2} d\omega = \frac{(\omega\rho/k)^2 - \rho^2 c^2}{\omega^2 - k^2 c^2} d\omega, \quad (9.86)$$

причем последний интеграл образуется здесь умножением числителя и знаменателя предыдущей подынтегральной функции на $\omega^2/k^2 - c^2$. Закон сохранения тока

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{j} \quad (9.87)$$

запишется теперь как

$$\omega \rho(k, \omega) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega). \quad (9.88)$$

С другой стороны, если обозначить через j_3 компоненту вектора $\mathbf{j}$ в направлении $\mathbf{k}$, то $j_3 = \omega \rho/k$ и

$$I + S_c = -2\pi \int \frac{|j_1(\mathbf{k}, \omega)|^2 + |j_2(\mathbf{k}, \omega)|^2 + |j_3(\mathbf{k}, \omega)|^2 - c^2 |\rho(\mathbf{k}, \omega)|^2}{\omega^2 - k^2 c^2 + i\varepsilon} \times \\ \times \frac{d^3 \mathbf{k} d\omega}{(2\pi)^4}. \quad (9.89)$$

Сумма трех токовых членов представляет собой не что иное, как скалярное произведение $\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega)$; поэтому выражение (9.89) — скаляр и его релятивистская инвариантность очевидна.

Учитывая неполноту наших сегодняшних представлений о квантовых законах взаимодействия, предположим, что расходящиеся интегралы можно регуляризовать простым введением в подынтегральное выражение релятивистски-инвариантного множителя

$$\left(\frac{-\Lambda^2}{\omega^2 - k^2 c^2 - \Lambda^2 + i\varepsilon} \right)^2,$$

где величина Λ — некоторая достаточно большая частота. При малых значениях величин ω и k этот множитель близок к единице, в то время как для высоких частот он обрезает подынтегральную функцию. Очевидно, что такая операция не нарушает релятивистской инвариантности интеграла. Теперь все физические величины должны вычисляться нами с учетом того, что действие $I + S_c$ содержит этот обрезающий множитель. Если, подобно лэмбовскому сдвигу они будут нечувствительны к выбору конкретного значения Λ (лишь бы это значение было достаточно велико), то теоретический результат можно считать достоверным. Если же результат расчета существенно зависит от выбора Λ (как это имеет место, например, для разности масс нейтрального и заряженного пионов), то его количественную величину устано-

вить невозможно, поскольку обрезаящая функция произвольна, а сам прием с ее введением уже нельзя считать удовлетворительным.

Таково состояние квантовой электродинамики на сегодняшний день.

Задача 9.11. Покажите, что метод обрезаящей функции действительно не является вполне удовлетворительным теоретически. Для этого покажите, что величина γ , вычислявшаяся в § 4 гл. 9, изменяется после введения обрезания, тогда как вероятность излучения реального фотона не должна изменяться (для него $\omega = kc$ и функция обрезания точно равна единице). Таким образом, нарушился бы баланс вероятностей и сумма их по всем возможным событиям (фотон излучился или не излучился) стала бы отличной от единицы.

Трудность, возникающая в связи с этой проблемой, до сих пор остается неразрешенной. Нам пока не известно никакой модификации квантовой электродинамики в области высоких частот, которая одновременно сделала бы все результаты конечными, не нарушала бы релятивистской инвариантности и сохраняла значение суммы вероятностей всех альтернатив равным единице.

Задача 9.12. Используя соотношение

$$\int e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \omega t)} \frac{cd^3\mathbf{k} d\omega / (2\pi)^4}{(2\pi)^4 (\omega^2 - k^2 c^2 + i\varepsilon)} = \frac{i}{(t^2 c^2 - R^2 - i\varepsilon) (2\pi)^2} = \\ = \frac{1}{4\pi} \delta_+(t^2 c^2 - R^2). \quad (9.90)$$

перейдите в функции действия $I + S_c$ к пространственным координатам. [Замечание: функцию $-\pi i / (x - i\varepsilon)$ часто записывают как $\delta_+(x)$; мы тоже пользуемся этим обозначением.] В результате должно получиться

$$I + S_c = \frac{1}{2c} \int [c^2 \rho(\mathbf{R}_1, t_1) \rho(\mathbf{R}_2, t_2) - \mathbf{j}(\mathbf{R}_1, t_1) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{R}_2, t_2)] \times \\ \times \delta_+[(t_1 - t_2)^2 c^2 - |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^2] d^3\mathbf{R}_1 d^3\mathbf{R}_2 dt_1 dt_2. \quad (9.91)$$

§ 7. Излучение света

В § 4 гл. 9 мы нашли выражение для амплитуды вероятности того, что поведение материальной системы зависит от ее взаимодействия с электромагнитным полем; это выражается формулой (9.60) и последующими выкладками. Однако наш вывод относился лишь к специальному случаю, когда начальное и конечное состоя-

ния поля являются вакуумными и не содержат фотонов. Мы видели, что при этом действие $S_{\text{част}}$ в интегралах по траекториям следует заменять на эффективное действие $S'_{\text{част}} = S_{\text{част}} + I$.

В общем случае фотоны поля присутствуют как в начале, так и в конце процесса. Для примера рассмотрим случай, когда в начальном состоянии нет ни одного фотона, а в конечном участвует один фотон с импульсом $\hbar L$ и поляризацией 1. Единственное изменение, которое при этом вносится в наши предыдущие расчеты, касается интеграла для действия S , т. е. выражения (9.61). Теперь мы должны пользоваться соотношением

$$X' = \frac{\pi}{k} \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_{\text{част}} + S_{\text{поле}}) \right] \mathcal{D}a_{1k} \mathcal{D}a_{2k}, \quad (9.92)$$

где интегрирование по траекториям выполняется между начальным состоянием вакуума и конечным, содержащим то же состояние вакуума плюс один фотон. В этом случае каждый осциллятор, кроме осциллятора $1L$, переходит из начального состояния $n = 0$ в такое же конечное состояние; поэтому интеграл X_{1k} для всех этих осцилляторов не изменяется. Изменится лишь вклад от осциллятора $1L$, который теперь становится равным

$$X'_{1k} = \int \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int \left[\sqrt{4\pi} (j_{1L}^* a_{1L} + j_{1L} a_{1L}^*) + \dot{a}_{1L}^* \dot{a}_{1L} - k^2 c^2 a_{1L}^* a_{1L} - \frac{\hbar L c}{2} \right] dt \right\} \right) \mathcal{D}a_{1L}. \quad (9.93)$$

Это выражение такого же типа, как и выражение (9.63), за исключением того, что переход осциллятора совершается между состояниями $n = 0$ и $n = 1$, тогда как ранее конечное состояние считалось также вакуумным. В § 9 гл. 8 мы рассмотрели поведение гармонического осциллятора под действием внешней силы; теперь воспользуемся этим результатом и запишем

$$X'_{1L} = \left(\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}} \int j_{1L} e^{iLct} dt \right) X_{1L}, \quad (9.94)$$

где X_{1L} — вычислявшееся выше выражение для перехода из вакуумного в вакуумное состояние. Мы видим, что появление одного фотона в конечном состоянии выражается в появлении множителя

$$\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}} \int j_{1L} e^{iLc} dt.$$

Поэтому для амплитуды вероятности мы можем записать

$$\text{Амплитуда} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}} \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_{\text{част}} + I) \right] \int j_{1L} \exp(iLct) dt \mathcal{D}q. \quad (9.95)$$

Аналогичное выражение, которое мы ранее получили с помощью теории возмущений, эквивалентно матричному элементу перехода

$$\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\text{част}}\right) \int j_{1L} \exp(iLct) dt \mathcal{D}q. \quad (9.96)$$

Очевидно, что полученный результат точно совпадает с результатом теории возмущений, если при вычислении амплитуды перехода вместо действия $S'_{\text{част}}$ применить полное эффективное действие $S_{\text{част}} = S_{\text{част}} + I$.

Выше было показано, что введение действия I приводит к небольшому изменению энергетических уровней; формально значения энергий становятся в этом случае комплексными. Последнее означает, что излучению соответствует спектральная линия некоторой конечной ширины, называемой *естественной шириной линии*. Не будем углубляться далее в детали всех этих вычислений и оставим их обсуждение, как и обобщение на большее число поглощаемых и излучаемых фотонов, тем, кто захочет более детально изучить эти специальные вопросы квантовой электродинамики.

§ 8. Краткие выводы

Обзор подхода в целом. В этой главе мы довольно много занимались исследованием квантованного электромагнитного поля. Стоит потратить некоторое время и вернуться назад, чтобы подчеркнуть основные идеи и полученные результаты.

Выделение кулоновского взаимодействия и применение бегущих волн для наших целей являются лишь техническими приемами; наиболее значительный результат содержится в выражении (9.89) или в эквивалентном ему (9.91). Рассмотрим этот результат с более общей точки зрения, приняв за основу выражение (9.91). Допустим, что наша система может быть описана с помощью действия

$$S = S_1(q) + S_2(q, A, \varphi) + S_3(A, \varphi), \quad (9.97)$$

где член $S_1(q)$ относится к веществу, член S_2 — к взаимодействию вещества и поля, а член S_3 — лишь к полю. Символом q обозначены здесь координаты материальных тел, а поле описывается координатами A и φ . Тогда амплитуда вероятности какого-либо события получается в результате вычисления интеграла типа

$$K = \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [S_1(q) + S_2(q, A, \varphi) + S_3(A, \varphi)]\right\} \mathcal{D}q \mathcal{D}A \mathcal{D}\varphi, \quad (9.98)$$

причем вопрос о граничных условиях задачи остается открытым.

Будем далее предполагать, что в начальном и конечном состояниях поля фотоны отсутствуют (т. е. поле переходит из вакуумного состояния снова в вакуумное). Такой выбор граничных условий мы сокращенно обозначим как вак-вак. Затем мы всегда будем интегрировать сначала по переменной $\mathbf{q}$, а лишь после этого по $\mathbf{A}$ и φ . То, что мы делали до сих пор, соответствовало обратному порядку интегрирования: сначала по $\mathbf{A}$ и φ , а в качестве заключительного шага по $\mathbf{q}$.

Обычно действие $S_2(\mathbf{q}, \mathbf{A}, \varphi)$ линейно зависит от переменных поля $\mathbf{A}$ и φ и может быть записано в виде

$$S_2 = \int [\rho(\mathbf{R}, t) \varphi(\mathbf{R}, t) - \mathbf{j}(\mathbf{R}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}, t)] d^3\mathbf{R} dt, \quad (9.99)$$

где ρ и $\mathbf{j}$ — соответственно плотности заряда и тока, зависящие только от $\mathbf{q}$. Тогда интеграл по $\mathbf{A}$ и φ в формуле (9.98) гауссов и легко вычисляется.

Основной смысл соотношения (9.91) заключается в том, что оно дает нам значение этого интеграла, а именно

$$\int_{\text{вак}}^{\text{вак}} \left(\exp \frac{i}{\hbar} \left[S_3(\mathbf{A}, \varphi) + \int (\rho\varphi - \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}) d^3\mathbf{R} dt \right] \right) \times \\ \times \mathcal{D}\mathbf{A} \mathcal{D}\varphi = \exp \left(\frac{i}{\hbar} J \right), \quad (9.100)$$

где действие J , которое в формуле (9.91) мы обозначали как $I + S_c$, равно

$$J = i \int [c^2 \rho(\mathbf{R}_1, t_1) \rho(\mathbf{R}_2, t_2) - \mathbf{j}(\mathbf{R}_1, t_1) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{R}_2, t_2)] \delta_+ [(t_1 - t_2)^2 c^2 - \\ - |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^2] d^3\mathbf{R}_1 d^3\mathbf{R}_2 dt_1 dt_2 \quad (9.101)$$

для любых функций ρ и $\mathbf{j}$, зависящих от $\mathbf{R}$ и t . В импульсном пространстве соотношение (9.101) запишется в виде (9.89).

Функции ρ и $\mathbf{j}$, которые входят в соотношение (9.98), зависят от $\mathbf{q}$ и $\mathbf{q}'$; поэтому мы получаем результат в виде

$$K(\text{вак-вак}) = \int \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S_1(\mathbf{q}) + J(\mathbf{q})] \right\} \right) \mathcal{D}\mathbf{q}, \quad (9.102)$$

где функционал $J(\mathbf{q})$ определяется выражением (9.101), куда предварительно должны быть подставлены требуемые значения ρ и $\mathbf{j}$. Таким образом, соотношение (9.102) содержит все основные результаты, относящиеся к переходам между двумя вакуумными состояниями. Изменение действия, относящегося к частицам, под влиянием поля мы учли добавлением функционала $J(\mathbf{q})$.

Таким образом, главным результатом, получаемым из соотношений (9.100) и (9.101), является эта наиболее важная формула электродинамики.

Общая формулировка квантовой электродинамики. Интересно также провести исследование в другом направлении, интегрируя вначале по всем координатам материальных тел, а лишь потом по полевым переменным. Мы ограничимся кратким описанием того, что при этом получается. Если в выражении (9.98) начинать с интегрирования по q , то множитель $\exp[(i/\hbar)S_3]$ можно опустить, так как он не зависит от q . Вводя обозначение

$$T[A, \varphi] = \int \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S_1(q) + S_2(q, A, \varphi)] \right\} \right) \mathcal{D}q, \quad (9.103)$$

мы можем (9.98) переписать в следующем виде:

$$K = \int \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_3(A, \varphi) \right] \right\} T[A, \varphi] \mathcal{D}A \mathcal{D}\varphi. \quad (9.104)$$

Это выражение описывает амплитуду вероятности определенного движения частицы, причем поле также совершает определенный переход из одного состояния в другое. Как и все другие амплитуды вероятности, эта амплитуда представляет собой сумму по всем возможным альтернативам. Каждая отдельная альтернатива выражается произведением амплитуды $T[A, \varphi]$, относящейся к движению частицы в некотором поле с определенными потенциалами A и φ , и амплитуды вероятности $\exp(iS_3/\hbar)$ того, что значения потенциалов поля именно таковы; суммирование производится по всем возможным полям A и φ .

Этот закон, выраженный математически соотношением (9.104), является фундаментальным принципом всей квантовой электродинамики. Его формулировка остается в силе даже тогда, когда функционал $T[A, \varphi]$, т. е. амплитуду движения частицы во внешнем поле (A, φ) , нельзя представить в виде интеграла по траекториям. Так, например, для релятивистской частицы со спином, описываемой уравнением Дирака, этот функционал нельзя выразить в виде простого интеграла по траекториям с какой-либо разумной функцией действия. Однако выражение для функционала $T[A, \varphi]$ можно получить и с помощью других методов, например из уравнения Дирака, а затем найти амплитуду K из соотношения (9.104).

Формулируя основной закон квантовой электродинамики (9.104), мы рассматривали поведение электромагнитного поля отдельно от поведения частицы (или системы частиц), с которой это поле взаимодействует. Сам факт, что такое разделение может быть проделано, является весьма важным результатом. Напри-

мер, функционал $T[A, \varphi]$ может быть связан с поведением атомного ядра, свойства которого известны неполностью. Однако для квантового решения электродинамических задач нам вполне достаточно знать лишь поведение этого ядра в известном внешнем поле.

Разумеется, для непосредственного применения формулы (9.104) необходимо знать функционал T при всех значениях переменных A и φ ; к сожалению, такая подробная информация редко имеется в нашем распоряжении. Но и тогда, когда мы располагаем точным выражением для функционала, само вычисление интеграла по траекториям может вызвать трудности. Все же практически эта формула очень полезна. В некоторых случаях функционал T может быть аппроксимирован экспонентой типа (9.99) с линейной зависимостью показателя от переменных A и φ . Тогда интересующий нас результат следует непосредственно из общих выражений (9.100) и (9.101). Чаше функционал T можно представить в виде суммы или интеграла экспонент, зависящих от различных величин ρ и j ; тогда формула (9.104) приобретает вид соответствующей суммы или интеграла от выражений, содержащих экспоненту $\exp[(i/\hbar)J]$, где J определяется соотношением (9.101) после подстановки надлежащих значений ρ и j .

В большинстве практически важных случаев функционал T можно представить в виде степенного ряда по потенциалам A и φ . Если считать влияние поля на движение частицы достаточно малым, то несколько первых членов этого разложения могут быть вычислены методами теории возмущений. Найдя таким образом функционал, подставим его в (9.104) и проинтегрируем по A и φ ; в результате получится разложение амплитуды K по возмущениям (по степеням параметра $e^2/\hbar c$). Необходимые для этого интегралы вида

$$\int A_i(\mathbf{R}_1, t_1) A_j(\mathbf{R}_2, t_2) \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_3(A, \varphi) \right] \right\} \mathcal{D}A \mathcal{D}\varphi = \\ = 2\hbar \delta_+[(t_1 - t_2)^2 c^2 - |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|^2]$$

можно вычислить, разлагая по степеням ρ и j выражения (9.100) и (9.101), а затем сравнивая соответствующие члены. Мы не будем углубляться в эти вопросы квантовой электродинамики и отсылаем интересующегося читателя к работе [7].

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

В предыдущих главах мы рассмотрели переходы системы из одного известного состояния в другое. Однако для большинства реальных физических ситуаций начальное состояние полностью не определено: система может с некоторой вероятностью пребывать в различных таких состояниях. Тогда и конечное состояние является в такой же степени неопределенным, поскольку набору исходных ситуаций отвечает набор возможных результатов процесса с соответствующими вероятностями. С другой стороны, нас может интересовать не вероятность определенного результата, а распределение вероятностей целого набора таких результатов.

Особенно интересным случаем статистичности состояний является тепловое равновесие при некоторой температуре T . Квантовомеханическая система, находясь в тепловом равновесии, занимает определенный энергетический уровень. Как показано в квантовой статистике, вероятность найти систему в состоянии с энергией E пропорциональна $\exp(-E/kT)$, где kT — температура в естественных энергетических единицах (коэффициент перехода k , называемый постоянной Больцмана, равен $1,38047 \times 10^{-16}$ эрг/град, или 1 эв на 11606°K).

В нашей книге мы не станем ни выводить это экспоненциальное распределение, ни обсуждать его; подчеркнем лишь, что энергия E представляет собой полную энергию системы. Если уровень энергии вырожден, то все состояния, отвечающие такому уровню, равновероятны. Это означает, что полная вероятность найти систему в состоянии с данной энергией умножается на кратность вырождения энергетического уровня.

Упомянутый выше экспоненциальный закон еще не представляет собой распределение вероятностей, поскольку он не нормирован. Запишем нормировочный множитель в виде $1/Z$; тогда вероятность пребывания системы в состоянии с энергией E_i (которое пока предполагается невырожденным) равна

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i \beta}, \quad (10.1)$$

где $\beta = 1/kT$. Это означает, что

$$Z = \sum_i e^{-E_i \beta}. \quad (10.2)$$

Подобную же нормировку можно осуществить, введя в показатель экспоненты некоторую энергию F :

$$p_i = e^{-\beta(E_i - F)}. \quad (10.3)$$

Величину F называют *свободной энергией Гельмгольца*. Очевидно, что ее значение зависит от температуры T , хотя сами уровни энергии E_i от T не зависят. Отсюда

$$Z = e^{-\beta F}. \quad (10.4)$$

§ 1. Функция распределения

Из экспоненциальной функции распределения можно вывести физические свойства системы, находящейся в тепловом равновесии. Пусть A — оператор некоторой величины, и ее среднее значение в i -м состоянии равно

$$A_i = \int \varphi_i^* A \varphi_i dV, \quad (10.5)$$

где интеграл берется по объему системы V . Тогда статистическое среднее от A по всей системе есть

$$\bar{A} = \sum_i p_i A_i = \frac{1}{Z} \sum A_i e^{-E_i \beta}. \quad (10.6)$$

Например, среднее (или ожидаемое) значение самой энергии равно

$$U = \sum p_i E_i = \frac{1}{Z} \sum E_i e^{-\beta E_i} = \sum E_i e^{-\beta(E_i - F)}. \quad (10.7)$$

Сумму (10.7) легко вычислить, если известна зависимость от температуры нормирующего множителя Z . Из равенства (10.2) следует:

$$\sum E_i e^{-\beta E_i} = -\frac{\partial Z}{\partial \beta} = kT^2 \frac{\partial Z}{\partial T}. \quad (10.8)$$

Поэтому

$$U = \frac{kT^2}{Z} \frac{\partial Z}{\partial T} = kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F). \quad (10.9)$$

Производные по температуре мы записали в виде частных производных, поскольку все другие переменные, такие, как объем системы или внешние влияния, фиксированы.

Интересно посмотреть, что происходит с ожидаемым значением энергии, если изменяется какая-нибудь другая переменная, например объем системы. Пусть система находится в определенном состоянии E_i , и мы немного изменяем величину какого-то

параметра α . Применяя методы теории возмущений, находим, что в первом приближении изменение энергии равно ожидаемому изменению гамильтониана, т. е.

$$E_i + \Delta E_i = \int \varphi_i^* (H + \Delta H) \varphi_i dV, \quad (10.10)$$

$$\Delta E_i = \int \varphi_i^* \Delta H \varphi_i dV.$$

На языке классической физики мы бы сказали, что отношение $\Delta H / \Delta \alpha$ представляет собой «силу», соответствующую изменению параметра α . В случае, когда этот параметр — объем, такой силой будет давление (взятое с обратным знаком). Таким образом, мы вводим понятие силы посредством соотношения

сила $\times$ изменение параметра = изменение энергии,

или

$$f_\alpha = \frac{\partial H}{\partial \alpha}. \quad (10.11)$$

Тогда, например, если P — давление, а V — объем,

$$-P \Delta V = \Delta E. \quad (10.12)$$

Запишем ожидаемое значение силы в виде

$$\begin{aligned} \bar{f}_\alpha &= \overline{\left(\frac{\partial H}{\partial \alpha} \right)} = \sum p_i \left(\frac{\partial H}{\partial \alpha} \right)_i = \sum p_i \frac{\partial E_i}{\partial \alpha} = \\ &= \sum \frac{1}{Z} \frac{\partial E_i}{\partial \alpha} e^{-E_i/kT} = -\frac{kT}{Z} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sum e^{-E_i/kT} \right) = -\frac{kT}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \alpha}, \end{aligned} \quad (10.13)$$

так что

$$\bar{f}_\alpha = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha}, \quad (10.14)$$

где β и все другие параметры постоянны. Используя выражение (10.4), можно переписать это как

$$\bar{f}_\alpha = \frac{\partial F}{\partial \alpha}. \quad (10.15)$$

Если параметр α представляет собой объем V , то величина $-\bar{f}_\alpha$ будет давлением P и

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V}. \quad (10.16)$$

Когда объем системы изменяется на бесконечно малую величину при постоянной температуре, одновременно возникают два эффекта. Во-первых, каждый из уровней энергии слегка сдви-

гается. Во-вторых, если система остается в равновесии при постоянной температуре (например, благодаря какому-то резервуару), то вместе с энергиями уровней должны измениться и вероятности. Если бы возникал только первый эффект, то мы могли бы, усреднив энергетические сдвиги по всем уровням, получить изменение полной энергии системы; в предыдущем рассмотрении это соответствует произведению давления на изменение объема. Однако поддержание постоянства температуры требует некоторого перераспределения населенности состояний. Поэтому полная энергия системы дополнительно изменится на величину, которую мы обозначим через dQ . Эта дополнительная энергия, называемая энергией теплообмена, отдается или отбирается той внешней системой (резервуаром), которая поддерживает постоянство температуры. Таким образом

$$dU = -P dV + dQ. \quad (10.17)$$

Величину dQ можно легко найти из выражения для U , определяемого равенством (10.7). Когда объем V изменяется на dV , каждый уровень энергии E_i испытывает изменение на dE_i , а свободная энергия Гельмгольца на dF . Следовательно, полная энергия меняется на величину

$$dU = \sum dE_i e^{-\beta(E_i - F)} + \beta dF \cdot \sum E_i e^{-\beta(E_i - F)} - \beta \sum E_i dE_i e^{-\beta(E_i - F)}. \quad (10.18)$$

Первый член в этом выражении представляет собой ожидаемое значение dE_i , которое, как мы уже выяснили, равно $-PdV$. Остальные два члена составляют dQ ; их также можно выразить через производные суммы (10.2) и в конечном итоге через F . Действительно,

$$dQ = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} dV. \quad (10.19)$$

Справедливость этого легко видеть и из равенства (10.17), которое дает

$$\frac{dQ}{dV} = \frac{\partial U}{\partial V} + P = \frac{\partial}{\partial V} \left(F - T \frac{\partial F}{\partial T} \right) - \frac{\partial F}{\partial V} = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}. \quad (10.20)$$

Выражение (10.19) определяет энергию теплообмена dQ , если объем системы изменяется на dV при постоянной температуре. Варьируя какой-либо другой параметр, мы получим аналогичный результат. Например, при изменении температуры T и постоянном объеме V энергия теплообмена равна изменению полной энергии, т. е.

$$\Delta Q = \frac{\partial U}{\partial T} \Delta T = \frac{\partial}{\partial T} \left(F - T \frac{\partial F}{\partial T} \right) \Delta T = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \Delta T. \quad (10.21)$$

В общем случае имеем

$$\Delta Q = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} \Delta V + \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial \alpha} \Delta \alpha + \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \Delta T \right). \quad (10.22)$$

Правая часть этого последнего выражения представляет собой произведение температуры T [на полное изменение величины $S = -(\partial F / \partial T)$, называемой *энтропией*]. Таким образом, запишем

$$\Delta Q = T \Delta S, \quad (10.23)$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad (10.24)$$

$$U = F - TS. \quad (10.25)$$

Очевидно, что все обычные термодинамические характеристики системы (такие, как внутренняя энергия, энтропия, давление и т. п.) можно вычислить, если известна одна-единственная функция — функция распределения Z , выраженная через температуру, объем и параметры внешних воздействий. Искомые величины получаются простым дифференцированием функции Z , или, что равнозначно, дифференцированием свободной энергии F .

Существуют такие физические параметры, определение которых (даже в случае термодинамически равновесной системы) требует больше информации, чем содержится в функции распределения. Предположим, например, что наша система находится в конфигурационном пространстве и мы интересуемся, какова вероятность обнаружить ее в точке x . Известно, что если состояние системы единственно и описывается волновой функцией $\varphi_i(x)$, то искомая вероятность равна квадрату модуля этой волновой функции $\varphi_i^*(x)\varphi_i(x)$. Таким образом, усредняя по всем возможным состояниям, получаем полную вероятность обнаружения системы в точке x :

$$P(x) = \frac{1}{Z} \sum_i \varphi_i^*(x) \varphi_i(x) e^{-\beta E_i}. \quad (10.26)$$

В общем случае, когда нас интересует какая-то величина A , ее ожидаемое значение определится выражением

$$\bar{A} = \frac{1}{Z} \sum_i A_i e^{-\beta E_i} = \frac{1}{Z} \sum_i \int \varphi_i^*(x) A \varphi_i(x) e^{-\beta E_i} dx. \quad (10.27)$$

Очевидно, что можно получить ожидаемые значения любых параметров, если известна функция

$$\rho(x', x) = \sum_i \varphi_i(x') \varphi_i^*(x) e^{-\beta E_i}. \quad (10.28)$$

Этой функции достаточно, поскольку оператор A под знаком интеграла (10.27) действует только на φ_i и не действует на φ_i^* . Предположим теперь, что в функции $\rho(x', x)$ A действует только на x' ; тогда в выражении $A\rho(x', x)$ полагаем $x' = x$ и выполним интегрирование по всем значениям x . Такая операция называется вычислением *шпура* матрицы $A\rho$.

Из определения функции $\rho(x', x)$, очевидно, следует, что

$$P(x) = \frac{1}{Z} \rho(x, x). \quad (10.29)$$

Поскольку вероятность $P(x)$ нормирована, так что интеграл от нее по всем x равен единице, мы имеем

$$Z = \int \rho(x, x) dx = \text{Sp}[\rho], \quad (10.30)$$

где Sp — сокращенное обозначение слова «шпур». Величина $\rho(x', x)$ называется *матрицей плотности* [точнее, статистической матрицей плотности, соответствующей температуре T ; термин «матрица плотности» широко применяется также в общем случае независимо от равновесности состояний систем и часто используется для обозначения нормированного варианта функции $\rho(x', x)/Z$]. Вычисление выражения (10.28) для отыскания матрицы плотности и является основной задачей статистической механики. Если мы интересуемся обычными термодинамическими переменными, нам нужен лишь шпур этой матрицы (диагональная сумма элементов), определяющий функцию распределения Z .

§ 2. Вычисление с помощью интеграла по траекториям

Матрица плотности, представленная в виде (10.28), очень похожа на общее выражение для ядра (4.59)

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sum_j \varphi_j(x_2) \varphi_j^*(x_1) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_j(t_2 - t_1) \right]. \quad (10.31)$$

Справедливость этого выражения ограничена условием $t_2 > t_1$ и требованием того, чтобы гамильтониан был постоянен во времени. Однако в статистической механике имеет место именно этот случай, так как равновесие может достигаться лишь тогда, когда гамильтониан не зависит от времени. Различие между выражениями (10.31) и (10.28) заключено в показателе экспоненты. Если разность $t_2 - t_1$ в формуле (10.31) заменить на $-i\beta\hbar$, то выражение для матрицы плотности формально совпадет с выражением

для ядра, соответствующего мнимому отрицательному интервалу времени.

Сходство между этими двумя выражениями можно установить и с другой точки зрения. Предположим, что мы записали матрицу плотности $\rho(x_2, x_1)$ в форме, близкой к виду ядра K , т. е. в виде $k(x_2, u_2; x_1, u_1)$, где

$$k(x_2, u_2; x_1, u_1) = \sum_i \varphi_i(x_2) \varphi_i^*(x_1) \exp\left(-\frac{u_2 - u_1}{\hbar} E_i\right). \quad (10.32)$$

Тогда, если положить $x_2 = x'$, $x_1 = x$, $u_2 = \hbar\beta$ и $u_1 = 0$, выражение (10.32) становится тождественным выражению (10.28).

Дифференцируя по u_2 , получаем

$$-\hbar \frac{\partial k}{\partial u_2} = \sum_i E_i \varphi_i(x_2) \varphi_i^*(x_1) \exp\left(-\frac{u_2 - u_1}{\hbar} E_i\right). \quad (10.33)$$

Вспомним теперь, что $E_i \varphi_i(x') = H \varphi_i(x')$; если считать, что оператор H_2 действует только на переменные x_2 , то можно записать уравнение

$$-\hbar \frac{\partial k(2, 1)}{\partial u_2} = H_2 k(2, 1) \quad (10.34)$$

или, в несколько иной форме,

$$-\frac{\partial \rho(2, 1)}{\partial \beta} = H_2 \rho(2, 1). \quad (10.35)$$

Заметим, что это дифференциальное уравнение для ρ аналогично уравнению Шредингера для ядра K , полученному в гл. 4 [соотношение (4.25)]. Можно переписать его в виде

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial K(2, 1)}{\partial t_2} = H_2 K(2, 1) \text{ для } t_2 > t_1. \quad (10.36)$$

В гл. 4 мы установили, что ядро $K(2, 1)$ представляет собой функцию Грина для уравнения (10.36); в том же самом смысле матрица плотности $\rho(2, 1)$ является функцией Грина для уравнения (10.35).

В случае простых гамильтонианов, зависящих только от импульсов и координат, мы смогли записать ядро в виде интеграла по траекториям. Например, гамильтониану

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (10.37)$$

соответствует решение для ядра, отвечающего очень короткому промежутку времени $t_2 - t_1 = \varepsilon$:

$$K(2, 1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_2 - x_1)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V\left(\frac{x_2 + x_1}{2}\right)\right], \quad (10.38)$$

что можно проверить прямой подстановкой в уравнение (10.36). Если мы возьмем произведение большого числа записанных в таком виде ядер и перейдем к пределу, одновременно устремляя ε к нулю и неограниченно увеличивая число сомножителей, то в итоге получим интеграл по траекториям, определяющий ядро для некоторого конечного промежутка времени. Решение уравнения (10.34) можно построить тем же самым способом. Для бесконечно малого интервала $u_2 - u_1 = \eta$ оно получается заменой $\varepsilon = -i\eta$ в выражении (10.38). Таким образом,

$$K(x_2, \eta; x_1, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\eta\hbar}} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{(m/2\eta)(x_2 - x_1)^2 + \eta V[(x_2 + x_1)/2]}{\hbar} \right\}. \quad (10.39)$$

В том, что это выражение действительно является решением уравнения (10.34), можно убедиться непосредственной подстановкой.

Функции, определенные для последовательных значений u , строятся по тому же правилу, что и ядра для последовательных интервалов времени, т. е.

$$k(2, 1) = \int k(2, 3) k(3, 1) dx_3. \quad (10.40)$$

Справедливость последнего следует из того факта, что выражение (10.33) представляет собой первую производную по u . Этим правилом можно воспользоваться, чтобы получить интеграл по траекториям, определяющий $k(2, 1)$:

$$k(x_2, u_2; x_1, u_1) = \int \left(\exp \left\{ -\sum_{i=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2\hbar\eta} (x_{i+1} - x_i)^2 + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \frac{\eta}{\hbar} V(x_i) \right] \right\} \right) \prod_{i=1}^{N-1} \frac{dx_i}{a}. \quad (10.41)$$

Нормировочную константу следует теперь выбрать в виде

$$a = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\eta}{m}}, \quad (10.42)$$

и интеграл вычисляется по всем траекториям, проходящим из точки x_1 в точку x_2 (т. е. x_i равно x_1 при $i = 0$ и x_2 при $i = N$) на отрезке $u_2 - u_1 = N\eta$.

Результат всех этих рассуждений заключается в следующем: если «траекторию» $x(u)$ рассматривать как некую функцию, связывающую значения координаты и параметра u , и если обозна-

чить через $\dot{x}$ производную dx/du , то матрица плотности выразится в виде

$$\rho(x_2, x_1) = \int \left(\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2(u) + V(x) \right] du \right\} \right) \mathcal{D}x(u). \quad (10.43)$$

Этот результат очень примечателен, поскольку поведение квантовомеханической системы полностью определяется здесь интегралом по траекториям, причем не появляется вездесущая мнимая единица i , столь характерная для квантовой механики (между прочим, этого не будет и в случае системы, движущейся в магнитном поле). Интеграл (10.43) намного удобнее в обращении, и его значительно легче интерпретировать наглядно, чем рассмотренные выше комплексные интегралы. Здесь легко видеть, например, почему некоторые траектории дают очень малый вклад в интеграл: для них отрицательный показатель экспоненты велик по модулю и потому подынтегральная функция ничтожно мала. Кроме того, отпадает необходимость в размышлениях о взаимной компенсации соседних траекторий; в данном случае все они суммируются совершенно равноправно, независимо от величины их вкладов.

Параметр u ни в каком смысле не является реальным физическим временем. Он представляет собой лишь параметр в выражении для матрицы плотности ρ . Однако мы можем, если хотим воспользоваться аналогией, считать u временем для некоторой траектории и интерпретировать выражение (10.43) весьма наглядным образом. По сути дела, мы подыскиваем физическую аналогию для математического выражения; будем называть u «временем» в кавычках, которые должны напоминать нам, что это не есть физическое время (хотя u и в самом деле имеет размерность времени). Подобным же образом назовем $\dot{x}$ «скоростью», $m\dot{x}^2/2$ — «кинетической энергией» и т. д. В этом смысле выражение (10.43) утверждает, что матрица плотности, соответствующая температуре $1/\beta$, образуется следующим образом:

Рассмотрим все возможные траектории («движения»), посредством которых система может переходить между начальной и конечной конфигурациями за «время» $\beta\hbar$; матрица плотности является суммой вкладов от каждого такого движения, причем вклад отдельного движения равен деленному на $\hbar$ интегралу по «времени» от «энергии» для рассматриваемой траектории.

Если мы выберем только те случаи, когда конечная конфигурация совпадает с начальной, и просуммируем по всем начальным конфигурациям, то получим функцию распределения.

Задача 10.1. Покажите, что матрица плотности в случае гармонического осциллятора имеет вид

$$\rho(x', x) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \operatorname{sh} \omega\beta\hbar} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar (\operatorname{sh} \omega\beta\hbar)^2} \times \right. \\ \left. \times [(x^2 + x'^2) \operatorname{ch} \omega\beta\hbar - 2xx'] \right\}. \quad (10.44)$$

Сравните это выражение с результатами задачи 3.8. Покажите также, что свободная энергия равна $kT \ln [2\operatorname{sh} (\hbar\omega/2kT)]$. Последнюю величину проверьте прямым вычислением суммы (10.2).

Если температура не слишком низка (далее будет обсуждаться вопрос, какая температура является слишком низкой), то $\beta\hbar$ очень мало. Поэтому при вычислении функции распределения, для которой $x_1 = x_2$, каждая траектория, начинаясь в точке x_1 , возвращается в эту точку через очень короткое «время». Действительно, траектории не могут проходить в большом удалении от точки x_1 , поскольку возвращение назад потребует очень большой «скорости» и большой «кинетической энергии». Для таких траекторий экспонента в выражении (10.43) становится ничтожно малой и их вклад в сумму по всем траекториям будет незначителен. В силу этих обстоятельств траектории $x(u)$, которые должны рассматриваться при вычислении $V[x(u)]$, никогда не располагаются далеко от начальной точки x_1 . Поэтому в первом приближении можно записать для всех траекторий $V[x(u)] \approx V[x_1]$; тогда потенциальная энергия оказывается не зависящей от траектории и часть экспоненты, содержащую потенциал, можно вынести за знак интеграла. Таким образом, для не слишком малых температур

$$\rho(x_1, x_1) = e^{-\beta V(x_1)} \int_{x_1}^{x_1} \left\{ \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2(u) du \right] \right\} \mathcal{D}x(u). \quad (10.45)$$

В этом последнем выражении фигурирует такой же интеграл по траекториям, как и в случае свободной частицы. Его можно вычислить тем же способом, каким в гл. 3 вычисляли ядро для движения свободной частицы. В результате получим

$$\int_{x_1}^{x_2} \left\{ \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2(u) du \right] \right\} \mathcal{D}x(u) = \\ = \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} \exp \left[-\frac{mkT(x_2 - x_1)^2}{2\hbar^2} \right]. \quad (10.46)$$

Если нас интересует только функция распределения, то можно положить $x_2 = x_1$; тогда

$$\rho(x_1, x_1) = \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} e^{-\beta V(x_1)}. \quad (10.47)$$

Функция распределения представляет собой интеграл от этого выражения по всем начальным конфигурациям x_1 , т. е.

$$Z = V \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} \int e^{-\beta V(x_1)} dx_1. \quad (10.48)$$

Эта формула определяет искомое распределение в классическом приближении. С точностью до неопределенного множителя ее впервые получил Больцман как следствие классической механики. В более сложных случаях (например, при большем числе переменных) функция распределения оказывается произведением двух сомножителей. Первый из них — интеграл по траекториям, который получился бы, если бы все частицы оказались свободными; второй называется *конфигурационным интегралом* и содержит $e^{-\beta V}$, где V — потенциал системы, зависящий от всех N описывающих систему переменных. Например, в случае системы N частиц, взаимодействие которых определяется потенциалом $V(x_1, x_2, \dots, x_N)$, где x_a — вектор положения частицы a , этот интеграл имеет вид

$$\int \{ \exp [- \beta V (x_1, x_2, \dots, x_N)] \} d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N.$$

Такое простое выражение для функции распределения является лишь приближением, справедливым в случае, если за «время» $\beta\hbar$ частицы системы не могут значительно удалиться от своих первоначальных положений. Предельное удаление частиц, на котором это приближение теряет силу, можно оценить из равенства (10.46). Легко видеть, что если конечная координата отличается от начальной на величину порядка

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{mkT}}, \quad (10.49)$$

то экспонента в (10.46) быстро убывает. Отсюда можно заключить, что все промежуточные точки, расстояние которых от начальной или конечной превышает Δx , окажутся на траекториях, не дающих заметного вклада в интеграл (10.43). Если при перемещении точки x на отрезок Δx потенциал $V(x)$ изменяется слабо, то справедлива классическая статистическая механика.

Например, для обычного твердого тела или жидкости с атомным весом порядка 20 Δx при комнатной температуре составляет около 0,1 Å, в то время как межатомные силы проявляются на расстояниях 1—2 Å. Поэтому смещения, превышающие 0,1 Å, не дадут вклада в матрицу плотности, тогда как потенциал останется неизменным до тех пор, пока смещение не достигнет 1—2 Å. Ясно, что в таких условиях классическая статистика будет достаточно точной.

Все загадочные переходы типа твердое тело — жидкость — газ лежат в области, где справедлива классическая статистика. Математическое описание подобных процессов упирается в проблему вычисления интеграла по координатам всех атомов от экспоненты $e^{-\beta V}$. На первый взгляд представляется неожиданным, что поразительное разнообразие столь специфических явлений описывается простым интегралом; однако это удивление длится лишь до тех пор, пока не осознан тот факт, что наш интеграл является многократным по огромному числу аргументов. Наш обычный опыт обращения с интегралами, зависящими от одной или самое большее нескольких переменных, ничем не помогает нам при тех качественных различиях, которые возникают при числе аргументов, приближающемся к бесконечности.

Своеобразие задач теории твердого тела, теории жидкостей и сжимающихся газов, как и поведение этого многократного интеграла, заключается в том обстоятельстве, что простые описания огромного множества простых систем, объединенных вместе, дают такое обилие явлений. Только воображение может помочь нам понять, каким образом объединение систем приводит к подобным результатам. Грубое качественное рассмотрение легко предсказывает многие из этих эффектов, однако и проблема количественного описания их тоже должна быть заманчива для физика-теоретика.

Существует много важных явлений статистического характера, для описания которых классическое приближение становится неприменимым. Трудности, вызываемые большим числом аргументов интеграции, усугубляются здесь еще и сложностью квантовомеханических понятий.

Строго говоря, выражение (10.48) открывает для нас несколько больше возможностей по сравнению с классической статистикой. Доказательством этому служит появление постоянной $\hbar$ в коэффициенте перед интегралом. В классической механике функцию распределения можно было получить лишь с точностью до постоянного множителя; поэтому и логарифм ее определялся только с точностью до произвольной аддитивной константы. Поэтому в выражении для свободной энергии появлялся член, пропорциональный температуре, а в энтропии — аддитивная константа, называемая иногда *химическим потенциалом*. Ее удалось вычислить лишь после того, как появилась квантовая механика.

§ 3. Квантовомеханические эффекты

Как мы уже упоминали, существуют случаи, когда классическое приближение не является достаточно точным. При этом необходимо учитывать изменение потенциала, возникающее в резуль-

тате движения частицы вдоль «траектории». В этом параграфе мы рассмотрим подобные влияния в первом приближении теории возмущений.

Вместо того, чтобы в выражении для матрицы плотности (10.43) заменять потенциал постоянной величиной $V(x_1)$, можно было бы попробовать разложить его в ряд Тейлора в точке x_1 . Однако проще и точнее было бы сделать это разложение в окрестности средней точки траектории, определяемой равенством

$$\bar{x} = \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} x(u) du, \quad (10.50)$$

которая существует для каждой траектории. По этим средним точкам можно интегрировать точно так же, как это делалось в выражении (10.48) по начальным точкам x_1 . При этом функция распределения принимает вид

$$Z = \int d\bar{x} \int_{x_1}^{x_1} \left[\exp \left(-\frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 du + \int_0^{\beta\hbar} V[x(u)] du \right\} \right) \right] \mathcal{D}x(u). \quad (10.51)$$

Здесь для интеграции выбраны траектории, удовлетворяющие двум условиям: 1) $\bar{x}$, определяемое равенством (10.50), фиксировано и 2) начала и концы траекторий совпадают (это означает, что интеграл включает также и интегрирование по всем точкам x_1).

Разлагая потенциал $V(x)$ в ряд Тейлора в точке $\bar{x}$, получаем

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta\hbar} V[x(u)] du &= \beta\hbar V(\bar{x}) + \int_0^{\beta\hbar} [x(u) - \bar{x}] V'(\bar{x}) du + \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} [x(u) - \bar{x}]^2 V''(\bar{x}) du. \end{aligned} \quad (10.52)$$

В силу равенства (10.50) второй член в правой части обращается в нуль. Таким образом, мы пришли к выражению, в котором первая отличная от нуля поправка будет поправкой второго порядка. Применяя это разложение и отбрасывая все старшие члены (третьего и высших порядков), получаем для функции распределения

$$\begin{aligned} Z \approx \int e^{-\beta V(\bar{x})} d\bar{x} \int_{x_1}^{x_1} \left[\exp \left(-\int_0^{\beta\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + [x(u) - \bar{x}]^2 V''(\bar{x}) \right\} \frac{du}{\hbar} \right) \right] \mathcal{D}x(u). \end{aligned} \quad (10.53)$$

Интеграл по траекториям в этом выражении отличается от предыдущих тем, что на траектории интегрирования наложено ограничение, выражаемое равенством (10.50). Для дальнейшего перепишем это равенство в виде

$$\int_0^{\beta\hbar} (x - \bar{x}) du = 0.$$

Подставляя в качестве координаты траектории $y = x - \bar{x}$, запишем это так:

$$\int_0^{\beta\hbar} y du = 0,$$

а сам интеграл преобразуем к виду

$$\int_{x_1 - \bar{x}}^{x_1 - \bar{x}} \left(\exp \left\{ - \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{m}{2} \dot{y}^2 + \frac{1}{2} y^2 V''(0) \right] \frac{du}{\hbar} \right\} \right) \mathcal{D}y(u). \quad (10.54)$$

Подынтегральная функция в этом выражении та же, что и в случае гармонического осциллятора, если его частота определяется соотношением $\omega^2 = -V''(0)/m$.

Теперь применим к этому интегралу ограничение на траектории следующим образом. Умножаем весь интеграл по траекториям на δ -функции $\delta \left(\int_0^{\beta\hbar} y du \right)$. Для того чтобы оперировать с δ -функцией под знаком интеграла, произведем над ней преобразование Фурье

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} [\exp(ikx)] \frac{dk}{2\pi}$$

и запишем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{x_1 - \bar{x}}^{x_1 - \bar{x}} \left\{ \exp \left[- \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{y}^2 + \frac{1}{2} V'' y^2 + iky \right) du \right] \right\} \mathcal{D}y(u). \quad (10.55)$$

Интеграл, представленный в такой форме, уже содержит в себе ограничения, накладываемые равенством (10.50), и мы можем прямо перейти к стандартным методам его вычисления, чтобы получить искомое решение. Отметим, что наш интеграл имеет тот же самый вид, что и в случае гармонического осциллятора, если m и V'' считать мнимыми. Мы интересуемся лишь

случаем малых V'' и в любой момент можем перейти к приближению, содержащему лишь члены первого порядка.

Задача 10.2. Вычислите интеграл (10.55), воспользовавшись методами гл. 3 и, в частности, соотношением (3.66). Напомним, что все траектории в этой задаче имеют одинаковые начальные и конечные точки и для завершения вычисления интеграла необходимо проинтегрировать по всем этим точкам, а затем по всем значениям k , после чего решение с точностью до первого порядка по V'' имеет вид

$$\text{const} \left[1 - \frac{\beta^2 \hbar^2}{24m} V''(\bar{x}) \right]. \quad (10.56)$$

Функцию распределения, которая соответствует решению задачи 10.2, лучше всего записать так (тоже с точностью до членов первого порядка по V''):

$$Z = \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} \int \left(\exp \left\{ -\beta \left[V(\bar{x}) + \frac{\beta\hbar^2}{24m} V''(\bar{x}) \right] \right\} \right) d\bar{x}. \quad (10.57)$$

Неизвестная константа определяется здесь простым сравнением с результатом классического рассмотрения (10.48). Мы видим, что функция распределения имеет тот же самый вид, что и функция, вычисленная в чисто классических предположениях. Разница состоит лишь в том, что теперь к потенциалу добавлена поправка $(\beta\hbar^2/24m)V''(\bar{x})$, которая по своей природе является, очевидно, квантовомеханической, как это можно понять из появления в ней постоянной Планка $\hbar$.

Задача 10.3. Покажите, что поправка к потенциалу в случае трехмерного движения нескольких частиц (которые мы будем различать по индексам; m_i — масса i -й частицы) равна

$$\frac{\beta\hbar^2}{24} \sum_i \frac{1}{m_i} \nabla_i^2 V. \quad (10.58)$$

На практике результаты этого вычисления оказываются не очень полезными. В большинстве задач (например, при рассмотрении газа сталкивающихся молекул) потенциал растет довольно быстро, так что на малых расстояниях происходит сильное отталкивание и вторая производная очень велика. В тех случаях, когда это не так, полученная формула может оказаться полезной. Ее преимущество состоит в том, что она допускает обобщение на члены более высокой степени точности.

Задача 10.4. Покажите, что поправка к функции распределения, учитывающая четвертую степень $\hbar$, содержит множитель

$$\left\{ 1 - \frac{\beta^2 \hbar^2}{24m} V''(\bar{x}) + \frac{7\beta^4 \hbar^4}{8 \times 720m^2} [V''(\bar{x})]^2 - \frac{\beta^3 \hbar^3}{24 \times 48m^2} V''''(\bar{x}) + \dots \right\}.$$

Мы уже видели, что для описания квантовомеханических эффектов можно вычислить функцию распределения по классической формуле (10.48), подставив вместо истинного потенциала $V(x)$ модифицированное выражение $V + (\beta \hbar^2 / 24m) V''$. Это обстоятельство наводит на мысль попытаться пойти дальше и отыскать некоторый эффективный потенциал $U(\bar{x})$, после подстановки которого вместо потенциала V классическое выражение (10.48) стало бы еще более точным приближением к истинной квантовомеханической функции распределения. Будем исходить из точного выражения

$$Z = \int \{ \exp[-\beta V(\bar{x})] \} d\bar{x} \int \exp\left(\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 du - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \{V[x(u)] - V[\bar{x}]\} du\right) \mathcal{D}x(u). \quad (10.59)$$

и рассмотрим интеграл по траекториям как среднее по траекториям $x(u)$ от функции e^f , где

$$f = - \int_0^{\beta\hbar} \{V[x(u)] - V[\bar{x}]\} \frac{du}{\hbar} \quad (10.60)$$

и усреднение производится с весовой функцией $\exp[-(m/2\hbar) \int \dot{x}^2 du]$. Заменяя здесь среднее от экспоненты на экспоненту от среднего

$$\langle e^f \rangle \rightarrow e^{\langle f \rangle}, \quad (10.61)$$

мы тем самым внесли бы погрешность второго порядка по f , или, точнее, порядка разности между $\langle f \rangle^2$ и $\langle f^2 \rangle$. В гл. 11 мы увидим, что можно определить знак этой погрешности (левая часть окажется больше правой).

Найдем среднее значение функции f для каждого $\bar{x}$:

$$\langle f \rangle = \frac{1}{\hbar} \int \left[\exp\left(-\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 du\right) \right] \int_0^{\beta\hbar} \{V[x(t)] - V[\bar{x}]\} dt \mathcal{D}x(u) \quad (10.62)$$

в предположении, что начальная и конечная точки совпадают, а сама траектория соответствует ограничению, накладываемому равенством (10.50).

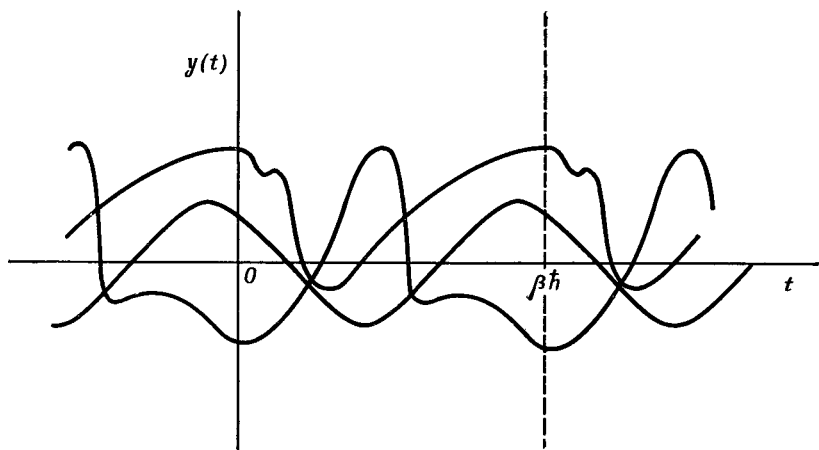
Для вычисления этого выражения рассмотрим несколько отличный, но связанный с ним интеграл

$$I(\bar{x}) = \int \int \left[\exp \left(-\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{y}^2 du \right) \right] \{V[\bar{x} + y(t)] - V[\bar{x}]\} \mathcal{D}y(u) dY, \quad (10.63)$$

где на траектории $y(u)$ накладывается ограничение

$$y(0) = y(\beta\hbar) = Y; \quad \int_0^{\beta\hbar} y(u) du = 0. \quad (10.64)$$

Оказывается, что интеграл $I(\bar{x})$ не зависит от t . Убедиться в этом можно при помощи следующего рассуждения. Предположим, что каждая траектория в этом интеграле не является конечной, а представляет собой, как показано на фиг. 10.1, отрезок

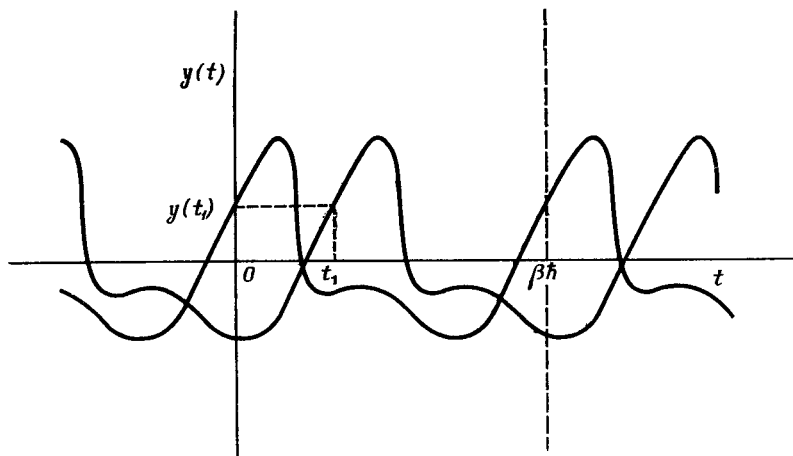


Ф и г. 10.1 Периодичность траекторий.

Все траектории, которые в момент $t = \beta\hbar$ возвращаются в исходную точку, соответствующую моменту $t = 0$, можно рассматривать как отрезки длины $\beta\hbar$ периодических траекторий, период которых равен $\beta\hbar$.

длины $\beta\hbar$ периодической траектории, период которой тоже равен $\beta\hbar$. Из всего семейства таких траекторий рассмотрим две: $y(t)$ и $y_1(t) = y(t_1 + t)$, как это показано на фиг. 10.2. Точка $y(t_1)$ на первой траектории, отвечающая моменту $t = t_1$, на второй траектории соответствует моменту $t = 0$, т. е. $y_1(0) = y(t_1)$. Кроме того, для любого другого момента t_i в этом семействе отыщется анало-

гичная функция $y_i(t)$, для которой $y_i(0) = y(t_i)$, и все такие траектории дадут одинаковый вклад в интеграл $\int_0^{\beta\hbar} y^2 du$. Все эти рассуждения применимы, конечно, к каждой траектории, учитываемой в интеграле (10.63). Поэтому, не ограничивая общности



Ф и г. 10.2. Выбор начального момента.

Предположим, что одна из «периодических» траекторий $y(t)$, показанных на фиг. 10.1, имеет при $t = t_1$ значение $y(t_1)$. Тогда совокупность всех «периодических» траекторий должна содержать эту же траекторию, сдвинутую влево на расстояние t_1 [т. е. $y(t + t_1)$] и принимающую при $t = t_1$ то же значение, что и в момент $t = 0$. Поэтому интеграл, усредненный по всем таким траекториям, не должен зависеть от выбора начального момента $t = 0$.

рассуждений, можно положить в интеграле $t = 0$, а это равносильно утверждению, что данный интеграл не зависит от переменной t .

Задача 10.5. Используя метод, кратко описанный в задаче 10.2, покажите, что величины $\langle f \rangle$ и $I(\bar{x})$ связаны соотношением

$$I(\bar{x}) = \sqrt{\frac{12m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} [V(\bar{x} + Y) - V(\bar{x})] e^{-6Y^2m/\beta\hbar^2} dY = \frac{\langle f \rangle}{\beta}. \quad (10.65)$$

Обозначим нашу приближенную функцию распределения через Z' , а связанную с ней свободную энергию Гельмгольца через F' , так что $Z' = e^{-\beta F'}$. Тогда, применяя результаты задачи 10.5 и соотношение (10.61), получаем

$$Z' = \int (\exp \{ -\beta [V(\bar{x}) + I(\bar{x})] \}) d\bar{x} \int \left[\exp \left(-\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 du \right) \right] \mathcal{D}x(u). \quad (10.66)$$

Входящий в это выражение интеграл по траекториям уже вычислялся раньше; он имеет вид (10.46). Таким образом, можно записать

$$e^{-\beta F'} = \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} \int e^{-\beta U(\bar{x})} d\bar{x}, \quad (10.67)$$

где

$$U(\bar{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} V(\bar{x} + y) e^{-6y^2m/\beta\hbar^2} dy \sqrt{\frac{12m}{2\pi\beta\hbar^2}}, \quad (10.68)$$

а потенциал $V(\bar{x})$ в явном виде не встречается.

Эти результаты означают, что свободную энергию F' можно приближенно вычислять классическим методом, т. е. с помощью выражения, подобного (10.48), и при этом получить хорошее приближение, если вместо $V(\bar{x})$ использовать эффективный потенциал $U(\bar{x})$, определяемый соотношением (10.68). Отметим, кстати, что эффективный потенциал зависит от температуры.

Потенциал $U(\bar{x})$ представляет собой среднее значение потенциала $V(x)$, полученное путем усреднения вокруг точки $\bar{x}$ с гауссовой весовой функцией, среднеквадратичное отклонение которой составляет $(\beta\hbar^2/12m)^{1/2}$. Если проанализировать различные неравенства, содержащиеся в нашем приближении, то мы найдем, что приближенное значение свободной энергии F' превышает ее истинное значение F . Подробности этого обсуждаются в следующей главе [см. неравенство (11.9) и далее].

Задача 10.6. Покажите, что потенциал, определяемый соотношением (10.68), совпадает с «исправленным» потенциалом равенства (10.57) (т. е. с показателем экспоненты в этом равенстве), если в этом последнем разложить V в ряд Тейлора.

Задача 10.7. Проверьте справедливость нашего приближения на примере гармонического осциллятора, точное значение свободной энергии которого равно

$$F_{\text{точное}} = kT \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2kT} \right). \quad (10.69)$$

С помощью эффективного потенциала U вычислите приближенное значение свободной энергии; покажите, что

$$U = \frac{m\omega^2}{2} \left(x^2 + \frac{\beta\hbar^2}{12m} \right) \quad (10.70)$$

и

$$F_{\text{прибл}} = kT \left(\ln \frac{\hbar\omega}{kT} \right) + \frac{(\hbar\omega)^2}{24kT}. \quad (10.71)$$

При различных значениях частоты ω определите свободную энергию или, еще лучше, ее отношение к величине kT . Предполагается, что дробь $\hbar\omega/kT$ может, в частности, принимать значения 1, 2 и 4. Покажите, что, как и следовало ожидать, F' больше F и ошибка возрастает при уменьшении температуры. Обратите внимание, что даже если мы уходим очень далеко от классической области (т. е. когда отношение $\hbar\omega/kT = 2$, так что вероятность пребывания системы в основном состоянии составляет 85%), приближенные результаты все еще удивительно близки к истинным.

Сравните эти результаты с классическим приближением, где свободная энергия принимается равной $kT \ln(\hbar\omega/kT)$. Оно приводит к значениям $2F/\hbar\omega$, что видно из табл. 1.

Таблица 1

$\hbar\omega/kT$	1	2	4
Точное значение	0,08266	0,8546	0,9906
Наше приближение	0,08333	0,8598	1,0264
Классический предел	0,00000	0,6931	0,6931

§ 4. Системы с несколькими переменными

Если система зависит от нескольких переменных, то (за исключением специальных задач, связанных с рассмотрением свойств симметрии) формулы, описывающие ее поведение, получаются прямым обобщением уже изученных нами методов.

Жидкий гелий. В качестве примера рассмотрим задачу отыскания функции распределения в случае жидкого гелия. Предположим, что мы имеем N одинаковых атомов массы m , заключенных в некоторый объем. Предположим далее, что эти атомы взаимодействуют попарно; потенциал этого взаимодействия $V(r_{1,2})$ на больших расстояниях соответствует слабому притяжению, а на малых — очень сильному отталкиванию. Для наглядности можно представлять себе $V(r)$ как потенциал, описывающий столкновение твердых шариков, т. е. положить

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{при } r > 2,7 \text{ \AA}, \\ \infty & \text{при } r < 2,7 \text{ \AA}. \end{cases} \quad (10.72)$$

Лагранжиан такой системы имеет вид

$$L = \sum_i \frac{1}{2} m |\dot{\mathbf{R}}_i|^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(r_{i,j}), \quad (10.73)$$

откуда следует, что функция распределения

$$Z = \int d^N \mathbf{R}(0) \int \left[\exp \left(- \left\{ \frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} |\dot{\mathbf{R}}(t)|^2 dt + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \frac{1}{2\hbar} \sum_{i,j} \int_0^{\beta\hbar} V[\mathbf{R}_i(t) - \mathbf{R}_j(t)] dt \right\} \right) \right] \mathcal{D}^N \mathbf{R}(t). \quad (10.74)$$

В этом выражении символ $d^N \mathbf{R}$ означает произведение $d^3 \mathbf{R}_1 d^3 \mathbf{R}_2 d^3 \mathbf{R}_3 \dots d^3 \mathbf{R}_N$, аналогично $\mathcal{D}^N \mathbf{R}$ — произведению $\mathcal{D} \mathbf{R}_1 \mathcal{D} \mathbf{R}_2 \mathcal{D} \mathbf{R}_3 \dots \mathcal{D} \mathbf{R}_N$. Мы предполагаем, что все интегралы по траекториям берутся между совпадающими начальными и конечными точками $\mathbf{R}_i(0)$ и $\mathbf{R}_i(\beta)$, т. е. $\mathbf{R}_i(0) = \mathbf{R}_i(\beta)$.

На самом деле записанное нами выражение (10.74) неправильно, так как свойства симметрии, упомянутые выше, имеют существенное значение. Здесь мы столкнулись с одной из интересных особенностей квантовой механики тождественных частиц. В гл. 1 упоминалось, что если событие протекает двумя неразличимыми способами, то амплитуды вероятности этих двух возможностей будут складываться. В частности, когда мы имеем дело с двумя неразличимыми частицами, любое событие всегда можно осуществить двумя способами, поменяв эти частицы ролями. При этом амплитуды, соответствующие случаю переставленных и случаю не переставленных частиц, должны складываться. Это правило относится к бозонам; в случае фермионов вклады в амплитуду, возникающие при нечетных перестановках, будут взаимно уничтожаться. Атомы обычного гелия, представляющего собой изотоп с массовым числом 4, содержат шесть частиц: два протона, два нейтрона и два электрона. Это означает, что атомы гелия являются бозонами и при перестановке частиц амплитуды должны складываться. Принято говорить, что бозоны подчиняются симметричной статистике, а фермионы — антисимметричной.

Для того чтобы увидеть, как происходит это сложение амплитуд, по крайней мере в случае атомов гелия, можно рассуждать следующим образом. В конечном состоянии атомы неотличимы друг от друга, поэтому, если даже конечная конфигурация совпадает с начальной, некоторые атомы могли поменяться местами.

Пусть, например, какой-то атом, который мы обозначим индексом 1, имеет в начальный момент положение $x_1(0)$. Мы уже предположили, что в конце это же положение займет по крайней мере

один атом. Таким образом, для некоторого атома значение x (β) равно $x_1(0)$. Конечно, закончить свое движение в этой точке может и не сам атом 1. Вместо этого он мог бы занять начальное положение атома 2, т. е. $x_2(0)$, тогда как в то же самое время атом 2 занял бы исходное положение атома 1; другими словами, атомы 1 и 2 в конечной конфигурации могут поменяться местами по сравнению с начальной.

Чтобы описать это наиболее общим образом, обозначим через Px_i некоторую перестановку атомов, первоначально находившихся в точках x_i . Тогда в упомянутом случае перестановки атомов 1 и 2 (все другие атомы остались на своих местах) можно записать

$$Px_1 = x_2, Px_2 = x_1, Px_3 = x_3, \dots, Px_N = x_N, \dots \quad (10.75)$$

Вообще говоря, расположение частиц в конечном состоянии может быть произвольной перестановкой их начальных состояний:

$$x_j(\beta) = Px_i(0). \quad (10.76)$$

Поэтому для построения полной амплитуды мы должны просуммировать по всем $N!$ возможным перестановкам, поскольку каждая из них является альтернативной возможностью. Если затем сделать усреднение по всем перестановкам, то получится правильная нормировка. Отсюда видно, что в случае симметричной статистики выражение (10.74) следует заменить выражением

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_P' d^N \mathbf{R}(0) \int_{\mathbf{R}_i(0)}^{P\mathbf{R}_i(0)} \left[\exp \left(-\frac{1}{2\hbar} \left\{ m \sum_i \int_0^{\beta\hbar} |\dot{\mathbf{R}}_i|^2 dt + \sum_{i,j} \int_0^{\beta\hbar} V[\mathbf{R}_i(t) - \mathbf{R}_j(t)] dt \right\} \right) \right] \mathcal{D}^N \mathbf{R}(t), \quad (10.77)$$

где символ $\sum_P'$ означает суммирование по всем перестановкам P .

Если бы мы имели дело с фермионами (например, с изотопом гелия, содержащим три нуклона в ядре), мы должны были бы ввести дополнительный множитель ± 1 , положительный для четных перестановок и отрицательный для нечетных. В окончательном варианте Z' имелись бы также некоторые дополнения, зависящие от спина атома.

Более детальный вывод выражения (10.77) можно сделать следующим образом. В случае атомов He^4 квантовомеханическая амплитуда для двух атомов, которые движутся от точек a и b до точек c и d , будет равна

$$K(c, a; d, b) + K(d, a; c, b) \quad (10.78)$$

(амплитуды для альтернативных конечных состояний суммируются в силу неразличимости этих состояний). В этом выражении $K(c, a; d, b)$ — комплексная амплитуда перехода частицы из точки a в точку c , в то время как вторая частица переходит из b в d .

Поскольку частицы неразличимы, то из свойств симметрии следует, что амплитуда вероятности обнаружить в конечном итоге эти частицы в точках c и d должна быть симметричной функцией. Следовательно, волновая функция $\psi(c, d)$ должна быть симметричной функцией переменных r_c и r_d , т. е.

$$\psi(c, d) = \psi(d, c). \quad (10.79)$$

Если бы частицы были фермионами, волновая функция оказалась бы антисимметричной функцией их положений.

Это правило легко обобщается на случай многих частиц:

$$\psi(1, 2, 3, \dots, N) = \begin{cases} \psi(1, 3, 2, \dots, N), \\ \psi(1, 2, 4, \dots, N), \\ \dots \end{cases} \quad (10.80)$$

Простейшее следствие этого общего правила состоит в том, что волновая функция обязана быть симметричной или антисимметричной. Несмотря на то что в общем случае существуют и другие решения уравнения Шредингера, в природе реализуются только симметричные и антисимметричные. Поэтому в выражении для функции распределения (10.2) мы должны суммировать не по всем значениям гамильтониана H , которые можно получить при решении уравнения $H\varphi_n = E_n\varphi_n$, а только по тем из них, волновая функция которых симметрична. Например, если не учитывать статистику N атомов, то матрица плотности $\rho(x', x)$ определяется выражением (10.28). Каким образом следует видоизменить сумму в этом выражении, чтобы в нее входили только лишь симметричные функции?

Для этого применим следующий искусственный прием. Заметим сначала, что из любой функции можно получить симметричную, поменяв местами переменные и сложив полученную новую функцию с исходной; независимо от вида $f(x_1, x_2)$ комбинация $f(x_1, x_2) + f(x_2, x_1)$ является симметричной функцией. Следовательно, для любой волновой функции $\varphi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ комбинация

$$\varphi'(x_i) = \sum_P \varphi(Px_i) \quad (10.81)$$

будет симметричной. Теперь заметим, что если $\varphi_n(x_i)$ является решением уравнения Шредингера, то $\varphi'_n(x_i)$, определенная выражением (10.81), также будет его решением, поскольку гамильтониан H симметричен относительно перестановки координат. Поэтому всякая функция $\varphi_n(Px)$ с переставленными координата-

ми, равно как и сумма этих функций, будет решением уравнения Шредингера.

Для некоторых собственных значений энергии E_n существуют симметричные собственные функции φ_n , а для некоторых — нет. Предположим, что E_k — какое-то собственное значение энергии, для которого уравнение Шредингера не имеет симметричного решения. В этом случае сумма $\sum_P \varphi_k(Px)$ должна обратиться в нуль, поскольку иначе она являлась бы симметричным решением, соответствующим значению E_k . Этот результат означает, что операция, определенная выражением (10.81), отбирает только те решения волновых уравнений, которые являются симметричными, а все другие решения отбрасываются. Если $\varphi_n(x)$ — симметричная функция, то она равна $\varphi_n(Px)$; поскольку существует $N!$ способов перестановки N атомов, мы имеем

$$\sum_P \varphi_n(Px_i) = \begin{cases} N! \varphi_n(x_i), & \text{если } \varphi_n \text{ симметрична,} \\ 0, & \text{если } \varphi_n \text{ имеет какие-то другие свойства симметрии.} \end{cases} \quad (10.82)$$

Этот результат и отвечает на наш вопрос. Теперь из суммы, определяющей матрицу плотности, нужно отобрать только те члены, которые относятся к симметричным состояниям. Таким образом,

$$\begin{aligned} \sum_P \rho(Px', x) &= \sum_n^{\text{все}} \sum_P \varphi_n(Px') \varphi_n^*(x) e^{-\beta E_n} = \\ &= N! \sum_n^{\text{сим}} \varphi_n(x') \varphi_n(x) e^{-\beta E_n} = N! \rho_{\text{сим}}(x', x). \end{aligned} \quad (10.83)$$

Именно поэтому мы, определяя функцию распределения в случае симметричной статистики, в выражении (10.77) переставляем частицы и делим результат на $N!$. Получаемая при этом функция распределения удовлетворяет соотношениям

$$\int \rho_{\text{сим}}(x_0, x_0) d^N x_0 = Z_{\text{сим}} = \sum_n^{\text{сим}} e^{-\beta E_n}. \quad (10.84)$$

Отметим некоторые характерные особенности соотношения (10.77). Для функции распределения мы должны были бы ожидать при высоких температурах классического решения, в котором отсутствовали бы квантовые эффекты. Пренебрежем на время потенциалом и рассмотрим влияние смещения атома в некоторую точку, отстоящую от исходной на расстояние d . В интеграле по траекториям (10.77) это соответствует смещению из начальной точки $R_i(0)$ в положение $PR_i(0)$, отличающееся перестановкой

атомов. Вклад каждой такой перестановки в общую сумму пропорционален $\exp(-md^2kT/2\hbar^2)$, т. е. уменьшается при увеличении температуры или при увеличении расстояния между атомами. Следовательно, пока атомы не находятся чрезвычайно близко друг к другу, никакие перестановки (даже простейший обмен местами между двумя атомами) несущественны по сравнению с тождественной перестановкой, которая оставляет все атомы на их прежних местах. Если же теперь учесть эффекты, связанные с потенциалом, который в жидком гелии резко возрастает на расстоянии $2,7 \text{ \AA}$ от центра атома, то несущественными оказываются все конфигурации, в которых межатомное расстояние меньше этой величины.

Поскольку при суммировании существенный вклад дает лишь тождественная перестановка, нам остается для рассмотрения только множитель $1/N!$. Уже на раннем этапе классической термодинамики физики отдавали себе отчет в том, что такой множитель удобен, когда частицы одинаковы, однако его смысл оставался неясным. Когда изучаются системы с несколькими различными сортами атомов, влияние этого множителя на величину химического потенциала называется *энтропией смешения*.

По мере падения температуры экспоненциальный множитель $\exp(-md^2kT/2\hbar^2)$, препятствующий переходам в новые конечные положения, становится все меньше и меньше. Это означает, что при чрезвычайно низких температурах в суммировании по перестановкам станут существенными новые члены. В этом случае должны быть, конечно, учтены квантовые эффекты; мы видели, что в первом приближении это можно сделать заменой потенциала V на эффективный потенциал U . С падением температуры, начиная примерно с $2,4\text{--}2,3^\circ\text{K}$, теплоемкость жидкого гелия начинает медленно возрастать.

Задача 10.8. Плотность жидкого гелия равна $0,17 \text{ г/см}^3$. Оцените по порядку величины температуру, начиная с которой для описания жидкого гелия становятся существенными перестановочные члены.

На первый взгляд представляется неожиданным, что очень сложные перестановки атомов играют существенную роль. Всякий раз, когда какой-нибудь атом перемещается на соседний участок, возникает экспоненциальный множитель, содержащий соответствующее расстояние. Обозначим этот множитель через y ; тогда в случае перехода на соседние участки r атомов необходимо учитывать множитель y^r , а поскольку y при любой температуре наверняка меньше единицы, то y^r в случае больших r может стать весьма малым. Казалось бы, что если r составляет заметную долю от пол-

ного числа атомов (в кубическом сантиметре жидкого гелия содержится 10^{22} атомов), то вклад от множителей вида y^r должен быть исчезающе малым. Однако это первое впечатление не учитывает того обстоятельства, что при этом возникает огромное число ($r!$) возможных перестановок. Поэтому малость влияния отдельной перестановки компенсируется их количеством.

Другой вопрос, возникающий при описании жидкого гелия, касается типа перестановок, которые следует учитывать. Любую перестановку можно описать посредством цикла; так, перестановки 1—4, 4—7, 7—6, 6—1 образуют цикл. Вопрос состоит в следующем: длинные или короткие циклы являются существенными? Внимательное исследование показывает, что при умеренных температурах важны только простые перестановки двух атомов. С падением температуры становятся существенными циклы из трех атомов, потом из четырех и т. д.; но внезапно при некоторой критической температуре циклы с длиной, превышающей L , благодаря своему громадному числу компенсируют убывание величины y^L . При этой температуре становятся важными очень длинные циклы, в которых участвуют почти все находящиеся в сосуде атомы. В этой точке кривая зависимости теплоемкости от температуры терпит разрыв, и при более низких температурах жидкий гелий ведет себя весьма удивительно: он без всякого сопротивления протекает сквозь очень тонкие трубки. Благодаря этому возникает бесконечно большая теплопроводность конечного объема жидкости и т. д. Эти удивительные свойства представляют собой проявления квантовомеханических эффектов, в частности интерференции амплитуд при замене одного атома другим, приводящей к увеличению суммарной амплитуды. Детали поведения теплоемкости в области температуры перехода не слишком надежны в смысле количественного описания, но качественно причина такого перехода ясна ¹⁾.

Выражение, аналогичное равенству (10.77), легко записать также и для фермионов, таких, как атомы He^3 . Однако в случае жидкого гелия-3 влияние потенциала очень сильно, что не позволяет производить точные количественные расчеты. Причина этого заключена в том, что вклад каждого цикла в сумму по перестановкам будет либо положительным, либо отрицательным в зависимости от четности числа атомов в цикле. Вклады таких циклов, как, например, $L = 51$ и $L = 52$, при низкой температуре прибли-

¹⁾ Более подробное обсуждение функции распределения для жидкого гелия можно найти в статье Фейнмана [Phys. Rev., 91, 1291 (1953)]. (Квантовая теория сверхтекучести была в 1947 г. разработана Н. Н. Боголюбовым [см. Вестник МГУ, 7, 43 (1947), а также монографию: Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, Новый метод в теории сверхпроводимости, АН СССР, 1958].— Прим. ред.)

зительно равны по модулю, а потому при суммировании они почти сокращаются. Приходится вычислять разность близких по величине членов, а это требует очень аккуратного вычисления каждого члена в отдельности. Известно, что знакопеременный ряд больших и медленно убывающих членов очень трудно суммировать, когда у вас нет точной аналитической формулы для членов.

Мы могли бы достичь известного прогресса, если бы в математическом описании ферми-системы можно было переходить к сумме положительных членов. Подобные преобразования были испробованы, однако получающиеся при этом выражения для членов ряда оказываются слишком сложны, чтобы оценивать их даже качественно.

Мы видели, что в случае молекул, отстоящих друг от друга на расстояния порядка $1 \text{ \AA}$, эффекты обмена (нетождественные перестановки) существенны лишь тогда, когда температура снижается до нескольких градусов Кельвина. Рассмотрим противоположный случай — поведение электронов в каком-нибудь твердом металле. Масса электрона намного меньше массы молекулы, и поэтому критическая температура для них оказывается значительно более высокой. При комнатной температуре электроны в металле точно описываются уравнениями, учитывающими лишь обменные эффекты описанных выше циклических перестановок. С этой точки зрения комнатная температура слишком низка для электронов. Доминирующее значение имеют обменные эффекты, т. е. электронный газ является вырожденным. Конечно, электроны взаимодействуют в соответствии с законом Кулона, и это взаимодействие довольно сильное; однако поскольку оно является дальнodelствующим, его влияние будет усредняться. Мы можем быть вполне удовлетворены приближением, в котором электроны считаются независимыми объектами, хотя реально каждый из них движется в периодическом потенциальном поле, создаваемом ядрами и соседними электронами. Тем не менее, уподобив электроны в металле идеальному ферми-газу (в котором отсутствует взаимодействие частиц), можно многое узнать об их поведении.

Однако ясно, что мы не сможем изучить это явление достаточно детально, поскольку в таком рассмотрении остается загадочной сверхпроводимость, возникающая в металлах при нескольких градусах Кельвина. При сверхпроводимости, по крайней мере у некоторых металлов, играет роль какое-то взаимодействие, связанное с медленными колебаниями атомов; это доказывается тем обстоятельством, что температура перехода для двух различных изотопов одного металла зависит от массы атома. Массовое число изотопа не могло бы влиять на процесс, если бы переход обуславливался взаимодействием самих электронов или их взаимодействием с жестко *фиксированными* атомами. Поэтому прибли-

жение, в котором атомы фиксированы, следует считать неправильным. Но каким образом колебания атомов приводят к внезапному скачку теплоемкости, а ниже критической температуры делают возможной электрическую проводимость без сопротивления? Этот вопрос впервые был убедительно разъяснен Бардином, Купером и Шриффером ¹⁾. Метод интегрирования по траекториям не сыграл в их анализе никакой роли; он фактически никогда не был полезен при рассмотрении вырожденных ферми-систем.

Закон Планка для излучения абсолютно черного тела. Легко получить функцию распределения для любой системы взаимодействующих осцилляторов. Такая система эквивалентна набору независимых осцилляторов с частотами ω_i . Величина свободной энергии F для совокупности независимых осцилляторов равна сумме свободных энергий каждого из этих осцилляторов. Последние, как это видно непосредственно из (10.69), равны

$$kT \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar \omega}{2kT} \right).$$

Поэтому свободная энергия всей системы запишется в виде

$$F = kT \sum_i \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar \omega_i}{kT} \right) = kT \sum_i \ln (1 - e^{-\hbar \omega_i/kT}) + \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2}. \quad (10.85)$$

Последний член в этом выражении представляет собой энергию основного состояния системы.

В случае электромагнитного поля, заключенного в объеме V , число мод равно удвоенному количеству значений волнового вектора $\mathbf{K}$; нулевая энергия при этом не учитывается. Следовательно, свободная энергия электромагнитного поля, отнесенная к единице объема, равна

$$F = kT \int \frac{d^3 \mathbf{K}}{(2\pi)^3} 2 \ln (1 - e^{-\hbar Kc/kT}). \quad (10.86)$$

Внутренняя энергия U представляет собой частную производную от βF по β , и после подстановки $\omega = Kc$ принимает вид

$$U = 2 \int \frac{d^3 \mathbf{K}}{(2\pi)^3} \hbar \omega \frac{1}{e^{\hbar \omega/kT} - 1}. \quad (10.87)$$

Элемент объема в импульсном пространстве можно записать так:

$$d^3 \mathbf{K} = 4\pi K^2 dK = 4\pi \frac{\omega^2}{c^3} d\omega. \quad (10.88)$$

¹⁾ J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev., 106, 162; 108, 1175 (1957). (Математически корректная теория этого явления была одновременно разработана Н. Н. Боголюбовым как обобщение его работ по теории сверхтекучести; см. литературу в примечании на стр. 314.—Прим. ред.)

Поэтому энергия электромагнитного поля, заключенная в области частот от ω до $\omega + d\omega$, равна

$$\frac{2 \cdot 4\pi}{(2\pi c)^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \cdot \quad (10.89)$$

Это и есть хорошо известный закон излучения абсолютно черного тела, открытый Планком. Он явился первым количественным результатом квантовой механики, который описывал наблюдаемое явление, и был первым шагом к открытию новых законов природы.

Другим триумфом на заре квантовой механики было объяснение Эйнштейном и Дебаем температурной зависимости теплоемкости твердых тел. Эта зависимость тоже вытекает из соотношения (10.85), с той лишь разницей, что осцилляторами теперь должны быть нормальные моды кристалла, описанные в гл. 8. Подобно выражению (10.87), тепловая энергия в единице объема такого кристалла (без учета нулевой энергии) будет равна

$$U = \sum_{3r \text{ мод}} \int \frac{\hbar \omega(\mathbf{k})}{\exp [\hbar \omega(\mathbf{k}) / kT] - 1} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (10.90)$$

где $\omega(\mathbf{k})$ — частота фонона с волновым вектором $\mathbf{k}$. Во всяком кристалле U будет многозначной функцией (если в единичном объеме находится r атомов, то существует $3r\omega$ значений для каждого $\mathbf{k}$), и мы должны просуммировать по всем возможным ω . Интегрирование по $\mathbf{k}$ распространяется только на конечную область, соответствующую данному кристаллу. Для фотонов каждому $\mathbf{k}$ соответствуют две моды с одинаковыми частотами $\omega = kc$, так что в сумме появляется множитель 2, и мы приходим к равенству (10.87), причем область интегрирования по $\mathbf{k}$ становится теперь бесконечной.

Следствия из выражения (10.90), изученные в различных приближениях Эйнштейном и Дебаем, хорошо объяснили основные особенности температурной зависимости теплоемкости и, в частности, ее поведение при низких температурах, которое находилось в прямом противоречии с предсказаниями классической физики. Сегодня, подставив в выражение (10.90) более точный фононный спектр $\omega(\mathbf{k})$, мы имеем вполне удовлетворительное описание той части теплоемкости твердых тел, которая обязана колебаниям атомов.

§ 5. О формулировке основных законов теории

Все предыдущее изложение статистической механики оставляет желать много лучшего. Основной принцип, утверждающий, что вероятность найти систему в состоянии с энергией E пропорцио-

нальна $e^{-E/kT}$, обычно выводят из рассмотрения взаимодействия сложных систем в течение длительных промежутков времени. Однако при этом возникает связанный с нашим подходом один интересный вопрос.

Обсуждение физики в этой книге мы начали с формулировки законов квантовой механики, применяя для этого метод интегрирования по траекториям (см. гл. 2). Проследим теперь, к чему приведет точка зрения, согласно которой такая формулировка как раз и является фундаментальной. В этом случае оказывается, что статистические свойства системы, квантовое поведение которой описано интегралом по траекториям, выражаются функцией распределения Z . В свою очередь эта функция также может быть выражена в виде некоторого интеграла по траекториям, очень схожего и тесно связанного с квантовомеханическим интегралом; подобная вещь проделана в соотношении (10.77). Однако для этого не требуется ни понятия волновой функции, ни существования стационарных состояний, ни вышеупомянутой гипотезы о длительном взаимодействии, — ничего из того, что было необходимо для вывода функции распределения в виде (10.1), зависящем от энергии уровней E_i . В заключение вернемся к формулировке Z с использованием исходного интеграла по траекториям. Существует ли какая-нибудь возможность получить для любой равновесной системы выражение Z прямо через интеграл по траекториям, описывая таким путем изменение ее состояний во времени? Если да, то мы еще не знаем, как это сделать.

Можно было бы спросить: а зачем это нужно? Это все равно что показывать свое умение плавать с заложенными за спину руками. В конце концов вы знаете, что энергетические уровни существуют. Единственным оправданием для такой попытки избавиться от их упоминания послужила бы возможность более глубокого понимания физических процессов или возможность привлечения более мощных статистических методов. Во всяком случае, разобраться в этом было бы интересно.

Отсюда и возникла идея — получить хорошо известный вариационный принцип, позволяющий вычислить наименьшую энергию системы непосредственно из исходной формулировки интеграла по траекториям, а не косвенно (из уравнения Шредингера). Результат излагается в гл. 11. Таким образом, плоды этих чисто академических размышлений оказались до некоторой степени и полезными, и интересными.

Однако (если так предпочтительнее) можно думать, что наша приверженность к определенному способу вычислений вызвана чисто академической заинтересованностью в методах классической физики. Пусть имеется система, подчиняющаяся принципу наименьшего действия, и ее действие определено соот-

ношением

$$S = \frac{1}{2} \int m \dot{x}^2 dt + \frac{k}{2} \int x(t) x(t+a) dt, \quad (10.91)$$

так что уравнением ее движения будет

$$m\ddot{x} = \frac{k}{2} [x(t+a) + x(t-a)]. \quad (10.92)$$

Здесь возникает любопытная ситуация, когда на систему действует сила, зависящая от полусуммы ее прошлого и будущего положений. Для уравнения (10.92) существуют экспоненциально растущие решения, но мы условимся считать допустимыми лишь те движения, при которых x остается конечным и в далеком прошлом, и в отдаленном будущем. Заметим, что если закон действия сформулирован в виде $\delta S = 0$, то отбрасываемые нами решения так или иначе исключаются, поскольку на все вариации траекторий накладывается условие $\delta x \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm \infty$.

Для такой системы можно записать некоторое выражение, описывающее сохранение энергии, потому что уравнения движения не зависят от времени. (Ни один простой гамильтониан не дает уравнений движения.) Возможно, что свойства системы позволяют ей подвергаться воздействию молекул газа и так достигать теплового равновесия. Зададимся вопросом: каковы средние значения параметров системы, которая подчиняется уравнению движения (10.92), удовлетворяющих граничным условиям на бесконечности, когда система находится в равновесии при температуре T ? Возможно, что такая задача неразрешима или, быть может, ее легко решить лишь в данном конкретном случае, когда уравнения движения линейны. Однако наша цель — выяснить, действительно ли для формулировки классической статистической механики необходимо существование гамильтониана и импульса или же можно изучать более широкий класс механических систем, для которых уравнения движения наиболее просто выводятся из принципа наименьшего действия, даже если функция действия содержит не только мгновенные положения и скорости частиц системы.

Этот вопрос представляет собой классический аналог нашего более интересного вопроса: каким образом в случае равновесного состояния системы мы переходим от описания ее механических свойств, выраженного через интегралы по траекториям, к такому же описанию с точки зрения статистической механики.

Задача 10.9. Покажите, что выражение

$$F(t) = \frac{1}{2} m [\dot{x}(t)]^2 - \frac{k}{2} x(t) x(t+a) + \frac{k}{2} \int_t^{t+a} x(t'-a) \dot{x}(t') dt' \quad (10.93)$$

является энергией для уравнения движения (10.92) и представляет собой сохраняющуюся величину.

Вообще для любого функционала действия S , не содержащего времени явным образом (т. е. инвариантный относительно преобразования $t \rightarrow t + \text{const}$) существует выражение для энергии $E(T)$ в момент T , которая будет сохраняющейся величиной. Это выражение можно найти, отыскивая в первом приближении изменение действия S при замене всех траекторий $x(t)$ на $x[t + \eta(t)]$, где $\eta(t) = +\varepsilon/2$ для $t > T$ и $\eta(t) = -\varepsilon/2$ для $t < T$ при постоянном ε . В случае бесконечно малого ε δS равно $\varepsilon E(T)$.

Задача 10.10. Рассмотрите, каким образом можно выразить через интегралы по траекториям статистико-механическое описание частицы, которая находится в магнитном поле, постоянном во времени.

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

В этой главе мы обсудим метод приближенного вычисления интегралов по траекториям, основанный на вариационном принципе. Сначала проиллюстрируем этот метод некоторыми примерами, а потом рассмотрим задачи, в которых он может оказаться полезным.

§ 1. Принцип минимума

Предположим, что мы хотим вычислить свободную энергию системы F . Эта задача может быть сформулирована на языке интегралов по траекториям с помощью функции распределения [см. выражение (10.4)]

$$Z = e^{-\beta F}. \quad (11.1)$$

В соотношении (10.30) функция распределения была представлена как интеграл от матрицы плотности $\rho(x, x)$. Затем в § 2 гл. 10 было получено выражение матрицы $\rho(x, x)$ в виде некоторого ядра. Это позволило нам записать

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{x_1}^{x_1} e^{S/\hbar} \mathcal{D}x(u) dx_1, \quad (11.2)$$

если переменную «времени» u рассматривать как мнимую величину.

В § 3 гл. 10 мы развили формализм теории возмущений для вычисления интегралов по траекториям, определяющих функцию распределения в некоторых частных случаях. Теперь опишем другой метод, применимый в тех случаях, когда действие S является *действительной* величиной, как это имеет место, например, в обычных задачах без магнитного поля (и без учета спина).

Всюду в этой главе мы будем предполагать, что при нашем выборе единиц $\hbar = 1$. Если возникнет необходимость ввести $\hbar$ для того, чтобы подчеркнуть квантовомеханический характер результата, это можно сделать непосредственным анализом размерности.

Пусть нам известно, что некоторая функция S' удовлетворяет двум условиям: во-первых, S' — достаточно простое выражение,

так что для простых функционалов G можно вычислить интегралы вида $\int e^{S'} \mathcal{D}x(t)$ или $\int G e^{S'} \mathcal{D}x(t)$; во-вторых, траектории, дающие существенный вклад в интегралы $\int e^S \mathcal{D}x(t)$ и $\int e^{S'} \mathcal{D}x(t)$, одинаковы, т. е. величины S' и S близки в случае, когда они обе малы. Предположим далее, что F' — свободная энергия, соответствующая действию S' . Это означает, что

$$e^{-\beta F'} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{x_1}^{x_1} e^{S'} \mathcal{D}x(u) dx_1 \quad (11.3)$$

и поэтому

$$\frac{\iint e^S \mathcal{D}x(t) dx_1}{\iint e^{S'} \mathcal{D}x(t) dx_1} = e^{-\beta(F-F')}. \quad (11.4)$$

Так как $e^S = e^{S-S'} e^{S'}$, то соотношение (11.4) можно записать в виде

$$\iint e^{S-S'} e^{S'} \mathcal{D}x(t) dx_1 \left[\iint e^{S'} \mathcal{D}x(t) dx_1 \right]^{-1} = e^{-\beta(F-F')}. \quad (11.5)$$

Это выражение утверждает, что экспонента $\exp[-\beta(F-F')]$ представляет собой среднее значение от величины $\exp(S-S')$; усреднение производится по всем траекториям, совпадающим в начальной и конечной точках, с весом $e^{S'} \mathcal{D}x(t)$ для каждой траектории. При усреднении учитываются все возможные значения x_1 .

Для дальнейших вычислений можно было бы предположить разности $S-S'$ и $F-F'$ малыми и соответствующие экспоненты в обеих частях равенства разложить с точностью до величин первого порядка малости. Справедливость такого шага представляется сомнительной, так как величина $\beta(F-F')$ не мала, если β велико. Однако сравнение членов более высокого порядка показывает, что это тем не менее оказывается хорошим приближением к величине $F-F'$.

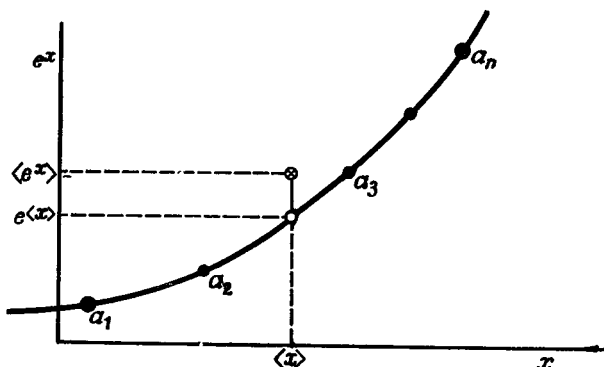
К тому же выводу можно прийти весьма строгим и убедительным путем. В самом деле, среднее значение экспоненты e^x , где x — независимая переменная, всегда больше или равно, чем экспонента от среднего значения x , до тех пор, пока x — действительная величина и используемые при усреднении веса положительны, т. е.

$$\langle e^x \rangle \geq e^{\langle x \rangle}, \quad (11.6)$$

где $\langle x \rangle$ — средневзвешенное значение x . Это следует из того, что кривая функции e^x вогнута вверх, как изображено на фиг. 11.1, так что если вдоль нее расположены массы, то центр тяжести

этих масс лежит выше кривой. Ордината этого центра тяжести равна среднему значению ординат точек, т. е. $\langle e^x \rangle$. Эта величина, очевидно, превышает $e^{\langle x \rangle}$ — ординату кривой в точке, соответствующей абсциссе центра тяжести, которая равна среднему значению $\langle x \rangle$.

В левой части равенства (11.5) берем среднее значение величины $e^{S-S'}$ по траекториям с положительными весами $e^{S'} \mathcal{D}x(t)$,



Ф и г. 11.1 Экспонента от среднего и среднее от экспоненты.

Мы считаем, что весовые множители a_i положительны, и рассматриваем их как различные массы, размещенные вдоль кривой. Тогда вследствие вогнутости кривой e^x экспонента от среднего значения x , т. е. $e^{\langle x \rangle}$, должна лежать ниже, чем средневзвешенное от экспоненты. Величина $e^{\langle x \rangle}$ лежит на кривой, а $\langle e^x \rangle$ — центр тяжести указанных точек — должен быть расположен над кривой.

где S' и S — действительные величины. Следовательно, в соответствии с (11.6) эта величина превысит $\exp \langle S - S' \rangle$, где $\langle S - S' \rangle$ — среднее значение $S - S'$ при том же способе усреднения [т. е. с весом $e^{S'} \mathcal{D}x(t)$]. Это означает, что

$$\langle S - S' \rangle = \iint (S - S') e^{S'} \mathcal{D}x(t) dx_1 \left[\iint e^{S'} \mathcal{D}x(t) dx_1 \right]^{-1} \quad (11.7)$$

и, следовательно,

$$e^{\langle S - S' \rangle} \leq e^{-\beta(F - F')}. \quad (11.8)$$

Отсюда

$$F_0 \leq F'_0 - \frac{1}{\beta} \langle S - S' \rangle. \quad (11.9)$$

И окончательно

$$F \leq F' - \delta, \quad (11.10)$$

где

$$\delta = \frac{1}{\beta} \iint (S - S') e^{S'} \mathcal{D}x(t) dx_1 \left[\iint e^{S'} \mathcal{D}x(t) dx_1 \right]^{-1}. \quad (11.11)$$

Именно здесь оказывается к стати принцип минимума. Он гласит, что если бы мы вычислили $F'_0 - \delta$ для различных «действий» S' ,

то результат, дающий наименьшее значение, был бы наиболее близок к правильному значению свободной энергии F^1). На самом деле энергия F соответствует, конечно, случаю $S' = S$, однако можно считать, что если S и S' отличаются на некоторую величину первого порядка малости, то отличие $F' - \delta$ от F не превышает величины второго порядка малости.

Если бы удалось угадать общий вид функции S' , пусть даже с точностью до каких-то неопределенных параметров, то можно было бы вычислить $F' - \delta$, оставляя эти параметры неизвестными. Затем, минимизируя $F' - \delta$, можно было бы подобрать лучшие значения этих параметров, «лучшие» в том смысле, что для них $F' - \delta$ наименее отличалось бы от истинного значения энергии F .

Аналогичный принцип минимума можно использовать, чтобы определить приближенное значение энергии наинизшего состояния системы E_0 . Напомним, что

$$Z = e^{-\beta F} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}. \quad (11.12)$$

По мере того как температура системы убывает (т. е. с ростом величины β), члены этого ряда, содержащие более высокие значения энергии, становятся все менее и менее существенными. При определенных обстоятельствах в ряду Z будет преобладать член с наименьшей энергией $e^{-\beta E_0}$, т. е.

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} Z = e^{-\beta E_0}. \quad (11.13)$$

Теперь, рассуждая подобно предыдущему случаю, можно просто заменить в формулах F на E_0 . Определим E'_0 как результат вычисления интеграла по траекториям с новым действием S' и запишем

$$E_0 \leq E'_0 - \delta \quad (11.14)$$

в качестве первого приближения в пределе больших значений β .

При отыскании E_0 с помощью этого приема наша задача будет несколько проще, чем в случае свободной энергии F . В частности, можно пренебречь условием совпадения начальной и конечной точек траекторий. Чтобы понять это, вернемся к выражению (10.28) и заметим, что с ростом β в матрице плотности $\rho(x', x)$ доминирующим также становится член нулевого порядка и она

¹⁾ Стоит снова подчеркнуть, что как S , так и S' не являются функционалами действия в собственном физическом значении этого понятия, так как оба они содержат мнимую переменную u , использованную в качестве «временной» переменной. Однако оперировать с интегралами по траекториям для этих функционалов можно так же, как для использованных выше физических функционалов действия.

стремится к величине $e^{-\beta E_0} \varphi_0(x') \varphi_0^*(x)$. Поэтому точки x' и x войдут только в предэкспоненциальный множитель, и их положение не повлияет на поведение экспоненты, в то время как оно является основным в таком вычислении E_0 .

§ 2. Применение вариационного метода

В качестве примера вычисления функции распределения с использованием только что описанного вариационного принципа рассмотрим случай одномерного движения одной частицы. Используя приближение, развитое в гл. 10, действие для такой частицы можно записать в виде

$$S = - \int_0^\beta \left\{ \frac{m}{2} [\dot{x}(t)]^2 + V[x(t)] \right\} dt. \quad (11.15)$$

Тогда при больших значениях β функция распределения равна

$$e^{-\beta E_0} \approx \int_{x_0}^{x_0} \left[\exp \left(- \int_0^\beta \left\{ \frac{m}{2} [\dot{x}(t)]^2 + V[x(t)] \right\} dt \right) \right] \mathcal{D}x(t) dx_0. \quad (11.16)$$

Этот интеграл взят по тем траекториям, которые возвращаются к исходным начальным точкам; после его вычисления проводится дальнейшее интегрирование по всем возможным начальным точкам.

В § 2 гл. 10 мы уже рассмотрели аналогичную задачу и выяснили, каким образом здесь можно получить классическое приближение. В классическом пределе при высоких температурах (когда kT велико по сравнению с $\hbar$) величина $\beta \hbar$ столь мала, что траектории, проходящие далеко от точки x_0 , не дают заметного вклада. Поэтому потенциал можно заменить постоянной величиной $V(x_0)$, и вклад интеграла по траектории будет постоянной величиной, равной

$$(e^{-\beta E_0})_{\text{классич}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int e^{-\beta V(x)} dx, \quad (11.17)$$

как показано в выражении (10.48).

В гл. 10 рассматривалось квантовомеханическое уточнение классического результата путем разложения потенциала в ряд около среднего положения траектории с точностью до членов второго порядка. Дальнейшее уточнение было достигнуто с помощью потенциала U , полученного специальным методом усреднения. Теперь мы видим, что такое приближение явилось частным случаем применения вариационного метода. Чтобы пояснить эту мысль, пересмотрим основные пункты рассуждений, используя обозначения и понятия этой главы.

Нашей задачей является вывести подходящую пробную функцию $W(\bar{x})$, где $\bar{x}$ — среднее положение траектории, определяемое выражением

$$\bar{x} = \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} x(t) dt. \quad (11.18)$$

Вдоль любой конкретной траектории эта подстановка фиксирует значение потенциала, так что действие принимает новый вид

$$S' = - \int_0^{\beta} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt - \beta W(\bar{x}). \quad (11.19)$$

С помощью этого более общего выражения можно вычислить как F' , так и $\langle S - S' \rangle$.

Следуя тем же путем, используем выражение (11.14). После всех необходимых подстановок получим

$$\begin{aligned} \delta = & \frac{1}{\int \int \left[\exp \left(- \int_0^{\beta} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right) \right] \{ \exp [- \beta W(\bar{x})] \} \mathcal{D}x(t) dx_0} \times \\ & \times \left(- \int \int \left\{ \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} V[x(t')] dt' - W(\bar{x}) \right\} \times \right. \\ & \times \left. \left[\exp \left(- \int_0^{\beta} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right) \right] \{ \exp [- \beta W(\bar{x})] \} \mathcal{D}x(t) dx_0 \right). \quad (11.20) \end{aligned}$$

Имеет смысл напомнить, что траектории, используемые в выражении (11.20), таковы, что их начальные и конечные точки совпадают и, подобно тому, как это сделано в формуле (11.16), в заключение проводится интегрирование по всем конечным точкам x_0 .

Отметим, что числитель выражения для δ очень похож на выражение для $I(\bar{x})$, введенное в (10.63), если ограничиться траекториями со средним значением $\bar{x}$ и отложить интегрирование по всем возможным значениям $\bar{x}$ на последний этап вычислений. Так же как и при нахождении величины $I(\bar{x})$, мы видим, что числитель в δ не зависит от t' . Интегралы по траекториям в числителе и знаменателе можно вычислить с помощью методов, применявшихся в гл. 10, и воспользоваться при этом результатом (10.65), заметив, что

$$Y = x_0 - \bar{x}. \quad (11.21)$$

Так как знаменатель является просто частным случаем выражения, стоящего в числителе, то

$$\delta = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [V(x_0) - W(\bar{x})] \left\{ \exp \left[-\frac{6m}{\beta} (x_0 - \bar{x})^2 \right] \right\} \times \\ \times \{ \exp [-\beta W(\bar{x})] \} dx_0 d\bar{x} \times \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left[-\frac{6m}{\beta} (x_0 - \bar{x})^2 \right] \right\} \times \right. \\ \left. \times \{ \exp [-\beta W(\bar{x})] \} dx_0 d\bar{x} \right)^{-1}. \quad (11.22)$$

Интеграл по x_0 в знаменателе выражения (11.22) легко вычисляется и дает $(\beta\pi/6m)^{1/2}$. Кроме того, интеграл в числителе, содержащий $W(\bar{x})$, дает в точности такой же сомножитель. Для последующего интегрирования в числителе и упрощения окончательного выражения удобно ввести функцию

$$\overline{V(\bar{x})} = \sqrt{\frac{6m}{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} V(x_0) \left\{ \exp \left[-\frac{6m}{\beta} (x_0 - \bar{x})^2 \right] \right\} dx_0. \quad (11.23)$$

Вид функции $\overline{V(\bar{x})}$ отражает учтенный нами квантовомеханический эффект. Эта функция является средневзвешенным потенциала $V(x_0)$ с гауссовой весовой функцией, подобно тому, как мы имели для функции $U(x_0)$, определенной соотношением (10.68); ширина гауссовой кривой равна снова $(\beta\hbar^2/12m)^{1/2}$. Для атома гелия при температуре 2°K эта ширина порядка $0,7 \text{ \AA}$, однако при комнатных температурах она составит не более 2% от $2,7 \text{ \AA}$ (диаметр атома гелия). Величину δ теперь можно записать в виде

$$\delta = \frac{\int [W(\bar{x}) - \overline{V(\bar{x})}] \{ \exp [-\beta W(\bar{x})] \} d\bar{x}}{\int \{ \exp [-\beta W(\bar{x})] \} d\bar{x}}. \quad (11.24)$$

Следующий шаг состоит в вычислении $W(\bar{x})$, исходя из того, что в соответствии с выражением (11.13) мы должны получить наименьшее значение величины $F' - \delta$. Значение F' определено выражением

$$-\beta E'_0 = \int e^{S'} \mathcal{D}x(t) = \int \left\{ \exp \left[-\int_0^\beta \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt - \beta W(\bar{x}) \right] \right\} \mathcal{D}x(t) = \\ = \int \{ \exp [-\beta W(\bar{x})] \} \int_{\substack{\bar{x} \text{ фикси-} \\ \text{ровано}}} \left[\exp \left(-\int_0^\beta \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right) \right] \mathcal{D}x(t) d\bar{x}. \quad (11.25)$$

Интеграл по траекториям здесь несложен и равен $\sqrt{m/2\pi\beta}$, так что получим

$$\exp(-\beta E'_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} d\bar{x}. \quad (11.26)$$

Следующий шаг — оптимальный выбор функции $W(\bar{x})$ — требует, чтобы мы определили влияние малых изменений функции $W(\bar{x})$ на значение величины $F' - \delta$ и приравняли его нулю. Поэтому, представив W в виде

$$W \rightarrow W(\bar{x}) + \eta(\bar{x}), \quad (11.27)$$

найдем из выражения (11.26) вариацию F' :

$$\partial E'_0 = \frac{\int \eta(\bar{x}) \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} d\bar{x}}{\int \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} d\bar{x}}, \quad (11.28)$$

а из выражения (11.24) определим вариацию δ :

$$\begin{aligned} \partial \delta = & \frac{\int \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} \{\beta \eta(\bar{x}) [\overline{V(\bar{x})} - W(\bar{x})] + \eta(\bar{x})\} d\bar{x}}{\int \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} d\bar{x}} + \\ & + \frac{1}{\left(\int \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} d\bar{x}\right)^2} \times \int \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} \times \\ & \times [W(\bar{x}) - \overline{V(\bar{x})}] d\bar{x} \int \beta \eta(\bar{x}) \{\exp[-\beta W(\bar{x})]\} d\bar{x}. \end{aligned} \quad (11.29)$$

Для нахождения экстремального значения правой части выражения (11.13) необходимо, чтобы

$$\partial E'_0 - \partial \delta = 0, \quad (11.30)$$

что имеет место, если выбрать

$$W(\bar{x}) = \overline{V(\bar{x})}. \quad (11.31)$$

Это в свою очередь означает, что $\delta = 0$ и что функция F' имеет такой же вид, как и классическая свободная энергия, определенная выражением (11.17). Однако потенциал в выражении для F' был заменен на $\overline{V(\bar{x})}$, поэтому

$$\exp(-\beta E'_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \int \{\exp[-\beta \overline{V(\bar{x})}]\} d\bar{x}, \quad (11.32)$$

где $\overline{V(\bar{x})}$ — эффективный классический потенциал, заданный выражением (11.24). При больших значениях β свободная энергия системы по существу совпадает с нижним уровнем энергии E_0 ,

поэтому выражение (11.32) мы можем интерпретировать как аппроксимацию E_0 . Это означает, что вариационный подход приводит к тому же результату, что и подход, изложенный в гл. 10 [см. выражения (10.67) и (10.68)].

§ 3. Стандартный вариационный принцип

В квантовой механике существует стандартный вариационный принцип, называемый методом Рэлея — Ритца. Он состоит в следующем: если H — гамильтониан системы, у которой наименьшее значение энергии равно E_0 , то для любой произвольной функции f имеет место соотношение

$$E_0 \leq \int f^* H f d(\text{объем}) \left[\int f^* f d(\text{объем}) \right]^{-1}. \quad (11.33)$$

Это соотношение довольно легко доказывается и имеет весьма широкое применение. Если функция f разложена в ряд по собственным функциям гамильтониана φ_n , т. е. если $f = \sum a_n \varphi_n$, то очевидно, что

$$\begin{aligned} \int f^* H f d(\text{объем}) \left[\int f^* f d(\text{объем}) \right]^{-1} &= \\ &= \sum_n |a_n|^2 E_n \left[\sum_n |a_n|^2 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (11.34)$$

Последнее выражение является усреднением по значениям энергии (с положительными весами $|a_n|^2$) и больше (или равно) наименьшему значению энергии E_0 . Смысл соотношения (11.33) совпадает с содержанием выражения (11.13); фактически это соотношение является частным случаем выражения (11.13) (чтобы быть более точными, ограничим этот вывод теми случаями, в которых гамильтониан H не содержит зависимости от магнитного поля; тогда наше заключение является вполне точным). Для иллюстрации связи между этими двумя соотношениями рассмотрим следующий пример.

Предположим, что действие S соответствует лагранжиану вида

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x), \quad (11.35)$$

где потенциал $V(x)$ не зависит от t (в противном случае, конечно, не существует никаких стационарных уровней энергии). Ограничимся одной переменной x , но обобщение на любое количество их не составит труда. Здесь же отметим, что если лагранжиан содержит член $\dot{x}A$ (например, если лагранжиан описывает частицу в магнитном поле), то соотношение (11.33) все еще остается в силе,

хотя действие S будет комплексным. Мы ожидаем, что в этом случае выражение (11.13) или же некоторые его простые модификации все еще останутся справедливыми. Однако это не доказано, поэтому ограничимся случаем, когда никакого магнитного поля нет. Тогда в пределе при больших значениях β будем иметь

$$\int \left(\exp \left\{ - \int_0^\beta \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt + \int_0^\beta V[x(t)] dt \right\} \right) \mathcal{D}x(t) \sim \exp(-\beta E_0). \quad (11.36)$$

Предположим теперь, что в качестве пробного мы используем действие

$$S' = \int_0^\beta \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt - \int_0^\beta V'[x(t)] dt, \quad (11.37)$$

которое содержит некоторый новый потенциал $V'(x)$. Это означает, что

$$S - S' = \int_0^\beta \{V[x(t)] - V'[x(t)]\} dt, \quad (11.38)$$

или

$$\delta = - \int e^{S'} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \{V[x(t)] - V'[x(t)]\} dt \mathcal{D}x(t) \left[\int e^{S'} \mathcal{D}x(t) \right]^{-1}. \quad (11.39)$$

Если бы нам было нужно определить среднее значение любой функции, которая зависит от траектории $x(t)$ таким же образом, как и в данном случае усреднения, то мы обнаружили бы, что это среднее значение слабо зависит от t , пока t не очень близко к нулю или к β . Поэтому с достаточной точностью можно написать

$$\begin{aligned} \delta &= - \int e^{S'} \{V[x(t)] - V'[x(t)]\} \mathcal{D}x(t) \left[\int e^{S'} \mathcal{D}x(t) \right]^{-1} = \\ &= \langle V[x(t)] - V'[x(t)] \rangle. \end{aligned} \quad (11.40)$$

Следуя методам, изложенным в гл. 2, можно вычислить этот интеграл по траекториям в предположении, что известны функции φ'_n и значения энергий E'_n , соответствующие S' . Пусть, например, наша траектория проходит между точками x_1 и x_2 ; в этом случае

$$\begin{aligned} \langle f[x(t)] \rangle &= \sum_n \{ \exp[-(\beta - t) E'_n] \} \times \\ &\times \{ \exp(-t E'_n) \} \varphi'_n(x_2) \varphi'_m(x_1) f_{nm} \times \\ &\times \left\{ \sum_n \{ \exp(-\beta E'_n) \} \varphi_n^*(x_2) \varphi_n(x_1) \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (11.41)$$

где

$$f_{nm} = \int \varphi_n^*(x) f(x) \varphi'_m(x) dx. \quad (11.42)$$

Если же β стремится к бесконечности и t тоже велико (например, $t = \beta/2$), то все экспоненты будут пренебрежимо малы по сравнению с экспонентой, содержащей наименьшее значение энергии E_0 . Таким образом, в пределе

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle f \rangle = f_{00}. \quad (11.43)$$

Этот результат можно записать в виде

$$\delta = - \int \varphi_0^* V(x) \varphi_0' dx + \int \varphi_0^* V'(x) \varphi_0' dx. \quad (11.44)$$

Мы, конечно, должны вычесть эту величину из E_0' . Однако если H' — гамильтониан, соответствующий действию S' , т. е. если

$$H' = \frac{p^2}{2m} + V'(x), \quad (11.45)$$

то

$$H' \varphi_0' = E_0' \varphi_0', \quad (11.46)$$

так что

$$E_0' - \delta = \int \varphi_0^* H' \varphi_0' dx + \int \varphi_0^* V \varphi_0' dx - \int \varphi_0^* V' \varphi_0' dx. \quad (11.47)$$

Но точный гамильтониан можно записать в виде

$$H = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + V' + V - V' = H' + V - V', \quad (11.48)$$

а это означает, что

$$E_0 \leq \int \varphi_0^* H \varphi_0' dx, \quad (11.49)$$

где φ_0' — нормированная волновая функция, соответствующая низшему энергетическому состоянию системы с гамильтонианом (11.45). Отметим, что оценка наименьшей энергии (11.49) зависит от произвольного потенциала $V'(x)$ только лишь через волновую функцию φ_0' . В силу неопределенности потенциала произвольной является и функция φ_0' . Поэтому вместо того, чтобы подбирать потенциал V' , находить по нему соответствующую волновую функцию и потом переходить к вычислению соотношения (11.49), мы могли бы подобрать волновую функцию и потом вычислить правую часть (11.49), совершенно не заботясь о потенциале, которому отвечает эта волновая функция. При таком подходе переменной является скорее волновая функция φ_0' , а не потенциал $V'(x)$. Отсюда видно, что полученный результат — просто другой способ толкования соотношения (11.33).

Если бы все задачи были такими, как в данном примере, когда оказывается применимым выражение (11.13), то не возникало бы оснований для столь длинных рассуждений. Однако существуют

значительно более сложные интегралы, для которых выражение (11.13), по крайней мере в той степени, насколько мы можем сейчас об этом судить, не столь просто преобразуется к соотношению (11.33). Такой пример мы рассмотрим в следующем параграфе.

§ 4. Медленные электроны в ионном кристалле ¹⁾

Пусть электрон движется в ионном кристалле, например в кристалле хлористого натрия. При этом он взаимодействует с ионами, которые не являются жестко закрепленными, и создает вокруг себя искажение кристаллической решетки. Если электрон движется, то область возмущения перемещается вместе с ним. Такой электрон вместе с возмущаемой им окрестностью был назван *поляроном*.

Вследствие возмущения решетки энергия электрона уменьшается. Кроме того, поскольку электрон перемещается и ионы должны двигаться согласованно с возмущением, то эффективная масса электрона (или, применяя общепринятый термин — масса полярона) превосходит значение массы, которое получилось бы, если решетка состояла бы из жестко закрепленных точек. Точный квантовомеханический анализ движения такого полярона чрезвычайно сложен, и мы сделаем некоторые допущения, удовлетворить которым в реальном случае, вероятно, весьма трудно. Тем не менее мы вслед за рядом физиков будем рассматривать такую идеализированную задачу [9] не только потому, что она, возможно, отражает реальное поведение электрона в кристалле, но также и потому, что она является одним из простейших примеров взаимодействия частицы и поля. Вариационный метод вычисления интегралов по траекториям оказывается в этом случае весьма плодотворным.

Сначала отметим, что даже если бы ионы были жестко закреплены в кристалле, тем не менее электрон двигался бы в очень сложном потенциальном поле. При этом можно показать, что существуют решения уравнения Шредингера для электрона с определенными волновыми числами k . Энергетические уровни в этих решениях обычно являются весьма сложными функциями волнового числа. Тем не менее мы предположим, что связь между энергией E и волновым числом k квадратична:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (11.50)$$

где m — постоянная величина, не обязательно равная массе электрона в вакууме. Далее заметим, что при воздействии электро-

¹⁾ См. работу [8].

на на решетку отрицательные ионы отталкиваются, а положительные притягиваются. Движение ионов можно исследовать, рассматривая их как набор гармонических осцилляторов и применяя методы гл. 8. Однако мы предположим, что возникают только такие высокочастотные гармоники, в которых ионы с разным зарядом движутся в противоположных направлениях. Частота гармоники ω_k зависит от волнового числа соответствующего собственного колебания, но мы пренебрежем этой зависимостью и будем считать, что ω — постоянная величина.

Наша задача заключается в том, чтобы найти электрическую силу, создаваемую возмущением, характеризуемым волновым числом $\mathbf{k}$, и определить движение электрона под действием этой силы. Пренебрежем пока атомной структурой и будем рассматривать вещество нашего кристалла просто как непрерывный диэлектрик, в котором распространяются волны поляризации. Если $\mathbf{P}$ — вектор поляризации, имеющий вид продольной волны

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{k}}{k} a_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (11.51)$$

то плотность заряда ионов равна

$$\rho = \nabla \cdot \mathbf{P} = k a_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (11.52)$$

Если V — потенциал, то

$$\nabla^2 V = \rho. \quad (11.53)$$

Поэтому если q_k — амплитуда k -й продольной бегущей волны, то поляризация a_k пропорциональна q_k и взаимодействие между волной поляризации и электроном пропорционально сумме членов вида $(q_k/k) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ по всем $\mathbf{k}$.

Так как энергия и импульс электрона связаны выражением $E = p^2/2m$, то мы можем записать лагранжиан всей системы в виде

$$L = \frac{1}{2} |\dot{\mathbf{r}}|^2 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} (q_k^2 - \dot{q}_k^2) + \left(\frac{2\sqrt{2}\pi\alpha}{V} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k} q_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (11.54)$$

Первый член этого выражения — энергия электрона с координатой $\mathbf{r}$, помещенного в кристалл с жесткой решеткой. Второй член представляет собой лагранжиан колебаний поляризации в предположении, что все волны поляризации имеют одинаковую частоту и амплитуда k -го собственного колебания равна q_k . Последний член является лагранжианом взаимодействия электрона с колебаниями решетки, где V — объем кристалла, α — постоянная величина. Чтобы упростить все последующие формулы, мы записали это выражение в безразмерном виде, т. е. единицы энергии, длины и времени выбраны так, что не только $\hbar$, но и общая частота осцилляторов ω , а также масса электрона m — все равны

единице. Тогда постоянная связи α равна безразмерному отношению:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon} \right) e^2, \quad (11.55)$$

где ε и ε_∞ — соответственно статическая и динамическая диэлектрические постоянные. В типичном случае, например в кристалле NaCl, значение α составляет около 5. Вычисляемые значения энергии будут выражены в единицах $\hbar\omega$.

После того, как мы решили задачу о движении гармонического осциллятора, можно изучить и квантовомеханическое движение электрона. Например, амплитуда вероятности того, что электрон выходит из точки $\mathbf{r}_1$, когда все осцилляторы находятся в основном состоянии, и заканчивает движение в точке $\mathbf{r}_2$ при условии, что все осцилляторы снова находятся в основном состоянии, равна

$$G_{00}(2, 1) = \int e^{iS} \mathcal{D}\mathbf{r}(t) \quad (11.56)$$

(при этом мы использовали результаты гл. 8) и

$$S = \frac{1}{2} \int \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right|^2 dt + \int \frac{\sqrt{2}\pi\alpha}{k^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(t)} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(s)} e^{-i|t-s|} dt ds \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (11.57)$$

Проинтегрировав по волновым числам $\mathbf{k}$, получим

$$S = \frac{1}{2} \int |\dot{\mathbf{r}}|^2 dt + \frac{\alpha i}{\sqrt{8}} \int \frac{e^{-i|t-s|}}{|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|} dt ds. \quad (11.58)$$

Величина $G_{00}(2, 1)$ зависит от начального и конечного положений электрона $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ и от рассматриваемого интервала времени T . Так как эта функция представляет собой ядро, она является решением волнового уравнения Шредингера, рассматриваемого в зависимости от величины временного интервала T . Поэтому в ее экспоненциальные множители войдут частоты, пропорциональные уровням энергии E_m . Найдем низший из этих энергетических уровней.

Как уже отмечалось, развивая наш вариационный принцип, мы не интересовались ядрами, в которых величина T имела бы смысл реального интервала времени; напротив, мы рассматривали мнимые величины, подобные появляющимся в выражении (11.8) при больших значениях β . Проследивая все этапы, приведшие к выражению (11.58), можно легко показать для мнимых значений временной переменной β , что окончательный вид ядра будет таким:

$$K(2, 1) = \int e^S \mathcal{D}\mathbf{r}(t), \quad (11.59)$$

где переменная t изменяется от 0 до β и

$$S = \frac{1}{2} \int \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right|^2 dt + \frac{\alpha}{\sqrt{g}} \iint \frac{\exp(-|t-s|)}{|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|} dt ds. \quad (11.60)$$

Этот результат совпадает с тем, что получится, если в выражении (11.58) переменную t заменить мнимой величиной it . При больших значениях β это ядро асимптотически становится пропорциональным $\exp(-\beta E_0)$.

Мы имеем сравнительно сложный интеграл по траекториям, к которому и попытаемся применить наш вариационный принцип. Сначала выберем некоторое простое действие S' , грубо аппроксимирующее истинное действие S , а потом найдем E' и δ .

Заметим, что в соответствии с выражением (11.60) на частицу в любой момент времени «воздействует» реакция от ее положения в предыдущий момент времени, которая обратно пропорциональна расстоянию между этими положениями и экспоненциально затухает с увеличением интервала между соответствующими моментами ¹⁾. Причиной этому служит то, что вызванное электроном возмущение в кристаллической решетке потребует некоторого времени для процесса релаксации ионов, и в этот релаксационный период электрон все еще будет «чувствовать» старое возмущение.

Попробуем ввести действие S' , обладающее всеми этими свойствами, за исключением того, что в законе взаимодействия вместо обратной пропорциональности расстоянию реакция положения будет иметь вид параболической ямы. Такая аппроксимация была бы непригодной, если расстояние $|\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(t)|$ очень часто становилось бы чрезмерно большим. Однако, поскольку интервалы времени ограничены экспоненциальным затуханием, силы взаимодействия, большие значения этой разности, не могут дать сколь угодно существенного вклада в интеграл. Поэтому запишем

$$S' = -\frac{1}{2} \int |\dot{\mathbf{r}}|^2 dt - \frac{1}{2} C \iint |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|^2 e^{-w|t-s|} dt ds. \quad (11.61)$$

Постоянная C определяет силу притяжения между электроном и ранее созданным им возмущением; будем рассматривать ее в качестве подгоночного параметра. Кроме того, без особых трудностей можно допустить, что закон обрезания экспоненты содержит некоторую отличную от единицы постоянную w . С ее помощью мы сможем частично компенсировать неточность, которая вносится при замене обратно пропорциональной зависимости от расстояния параболической ямой (в этой связи заметим также, что добавление еще одной постоянной в параболический член не улучшает резуль-

¹⁾ Хотя величина t в выражении (11.60) не является настоящим временем, а всего лишь переменной интегрирования, полезно рассматривать ее, как мы это делали в § 2 гл. 10, в качестве времени.

тата, так как такой член выпал бы при вычислении E'_0). Параметры C и w подберем далее таким образом, чтобы получить минимум E'_0 .

Поскольку действие S' мы выбрали квадратичным, то все существенные интегралы по траекториям легко вычисляются методами, описанными в гл. 2.

Сравнивая выражения (11.60) и (11.61), видим, что

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \langle S - S' \rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{8}} \int \left\langle \frac{1}{|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|} \right\rangle e^{-|t-s|} ds + \\ &+ \frac{1}{2} C \int \langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|^2 \rangle e^{-w|t-s|} ds = A + B. \end{aligned} \quad (11.62)$$

Сконцентрируем наше внимание на первом члене в правой части этого равенства A . Для выражения $|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|^{-1}$ в нем можно выполнить преобразование Фурье. Дело в том, что этот множитель возникает в результате преобразования Фурье при переходе от выражения (11.57) к (11.58). Таким образом, мы имеем

$$|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|^{-1} = \int d^3\mathbf{k} \exp\{i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)]\} (2\pi^2 k^2)^{-1}. \quad (11.63)$$

Теперь необходимо изучить выражение

$$\langle \exp\{i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)]\} \rangle = \frac{\int (e^{S'} \exp\{i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)]\}) \mathcal{Z} \mathbf{r}(t)}{\int e^{S'} \mathcal{Z} \mathbf{r}(t)}. \quad (11.64)$$

Интеграл в числителе имеет вид

$$\begin{aligned} I = \int \left\{ \exp \left[-\frac{1}{2} \int \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right|^2 dt - \frac{1}{2} C \int \int |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|^2 e^{-w|t-s|} dt ds + \right. \right. \\ \left. \left. + \int \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{r}(t) dt \right] \right\} \mathcal{Z} \mathbf{r}(t), \end{aligned} \quad (11.65)$$

где введено обозначение

$$\mathbf{f}(t) = i\mathbf{k}\delta(t - \tau) - i\mathbf{k}\delta(t - \sigma). \quad (11.66)$$

Поскольку выражение (11.65) зависит от $\mathbf{f}$ или $\mathbf{k}$, можно вычислить его, за исключением некоторого нормирующего множителя, который был опущен в (11.64). Между прочим, отметим, что в (11.65) три взаимно перпендикулярные компоненты разделяются и нам останется рассмотреть лишь скалярный случай. Метод интегрирования здесь совпадает с предложенным в гл. 3 для вычисления гауссовых интегралов по траекториям. Поэтому подставим $X(t) = X'(t) + Y(t)$, где $X'(t)$ — функция, для которой показатель экспоненты минимален; переменной интегрирования теперь является $Y(t)$. Поскольку показатель экспоненты квадратичен по $X(t)$, а X' определяет его экстремум, то $Y(t)$ может войти в пока-

затель только в квадрате, поэтому Y выделится как множитель, не содержащий f и обращающийся после интегрирования в постоянную (зависящую только от T):

$$I = \exp \left[-\frac{1}{2} \int \dot{X}'^2(t) dt - \frac{1}{2} C \iint [X'(t) - X'(s)]^2 e^{-w|s-t|} dt ds + \int f(t) X'(t) dt \right]. \quad (11.67)$$

Если время изменяется от $t = 0$ до $t = T$, то удобно выбрать граничные условия $X'(0) = X'(T) = 0$. Условие обращения в нуль вариации дает интегральное уравнение

$$\frac{d^2 X'(t)}{dt^2} = 2C \int [X'(t) - X'(s)] e^{-w|t-s|} ds - f(t). \quad (11.68)$$

С помощью этого уравнения выражение (11.67) можно записать в более простом виде:

$$I = \exp \left[\frac{1}{2} \int f(t) X'(t) dt \right]. \quad (11.69)$$

Теперь мы должны еще решить уравнение (11.68) и подставить результат в (11.69). Чтобы сделать это, введем функцию

$$Z(t) = \frac{w}{2} \int e^{-w|t-s|} X'(s) ds \quad (11.70)$$

так, чтобы

$$\frac{d^2 Z(t)}{dt^2} = w^2 [Z(t) - X'(t)]. \quad (11.71)$$

Тогда уравнение (11.68) принимает вид

$$\frac{d^2 X'(t)}{dt^2} = \frac{4C}{w} [X'(t) - Z(t)] - f(t). \quad (11.72)$$

Как видно, уравнения разделяются и легко решаются. Подстановка в соотношение (11.69) решения уравнения (11.68) $X'(t)$ дает

$$I = \exp \{ i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{X}(\tau) - \mathbf{X}(\sigma)] \} = \\ = \exp \left[-\frac{2Ck^2}{v^3 w} (1 - e^{-v|\tau-\sigma|}) - \frac{w^2}{2v^2} k^2 |\tau - \sigma| \right], \quad (11.73)$$

где мы положили

$$v^2 = w^2 + \frac{4C}{w}. \quad (11.74)$$

Этот результат нормирован правильно, так как он справедлив в случае $\mathbf{k} = 0$. После подстановки выражения (11.73) в (11.63) получим интеграл по $\mathbf{k}$ от простой гауссовой функции, так что для A имеем

$$A = \pi^{-1/2} \frac{\alpha v}{w} \int_0^\infty \left[w^2 \tau + \frac{v^2 - w^2}{v} (1 - e^{-v\tau}) \right]^{-1/2} e^{-w\tau} d\tau. \quad (11.75)$$

Чтобы найти B , нам нужно определить величину $\langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|^2 \rangle$. Ее можно получить, разложив обе части выражения (11.73) в ряд по $\mathbf{k}$ с точностью до членов порядка k^2 . Таким образом,

$$\frac{1}{3} \langle |\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)|^2 \rangle = \frac{4C}{v^3 w} (1 - e^{-|\tau - \sigma|}) + \frac{w^2}{v^2} |\tau - \sigma|. \quad (11.76)$$

Интеграл B теперь легко вычислить, и результат выражается в очень простом виде:

$$B = \frac{3C}{vw}. \quad (11.77)$$

В итоге нам нужно получить энергию E' , соответствующую действию S' . Эту величину проще всего найти дифференцированием обеих частей выражения (11.6) по C :

$$\frac{C dE'_0}{dC} = B, \quad (11.78)$$

так что с учетом выражений (11.77) и (11.74) получаем после интегрирования

$$E'_0 = \frac{3}{2} (v - w), \quad (11.79)$$

где мы учли, что $E'_0 = 0$ при $C = 0$. Поскольку $E'_0 - B = (3/4v)(v - w)^2$, то окончательно получим для энергии выражение

$$E = \frac{3}{4v} (v - w)^2 - A, \quad (11.80)$$

где A задано соотношением (11.75). Величины v и w — два параметра, которые для получения минимума можно варьировать порознь.

К сожалению, интеграл A нельзя вычислить в квадратурах, так что окончательное определение E требует численного интегрирования. Однако существует возможность найти приближенные выражения в различных предельных случаях. Случай больших α соответствует большим v . Выбор $w = 0$ приводит к интегралу

$$A = \pi^{-1/2} \alpha v^{1/2} \int_0^\infty e^{-\tau} d\tau (1 - e^{-v\tau})^{-1/2} = \frac{\alpha \Gamma(1/v)}{v^{1/2} \Gamma(1/2 + 1/v)} \quad (11.81)$$

и $E'_0 = 3v/4$. Это эквивалентно тому, что в выражении (11.37) используется потенциал, который соответствует свободным гармоническим колебаниям. При больших v членом $e^{-v\tau}$ можно пренебречь, так что $A = (\pi\omega)^{-1/2} \alpha v^{1/2}$. Для значений α , меньших чем 5,8, и при $w = 0$ выражение (11.80) не имеет минимума, только если не выполнено условие $v = 0$, так что случай $w = 0$ не даст единого выражения для всех значений α . Несмотря на этот недостаток, результат (11.81) сравнительно прост и достаточно точен.

При $\alpha > 6$ фактически существенны только большие значения v и пригодна приближенная формула

$$A = \alpha \left(\frac{v}{\pi} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{2 \ln 2}{v} \right); \quad (11.82)$$

при $v > 4$ эта формула выполняется с точностью до 1%. Однако, например, Фрелих [9] рассматривает разрыв при $\alpha = 6$ как серьезный недостаток — недостаток, которого можно избежать в нашей теории. Мы сделаем это, выбрав w отличным от нуля.

Изучим выражение (11.80) при малых значениях α и $w \neq 0$. Минимум будет иметь место, когда v близко к w . Поэтому положим $v = (1 + \varepsilon)w$, считая ε малым, и разложим радикал в выражении (11.81). Это даст

$$A = \alpha \frac{v}{w} \left[1 - \varepsilon \int_0^{\infty} \tau^{-3/2} e^{-\tau} (1 - e^{w\tau}) \frac{d\tau}{2\pi^{1/2}} + \dots \right], \quad (11.83)$$

интеграл равен

$$2w^{-1} [(1+w)^{1/2} - 1] = P. \quad (11.84)$$

В этом приближении задача сводится к минимизированию выражения

$$E = \frac{3}{4} w \varepsilon^2 - \alpha - \alpha \varepsilon (1 - P), \quad (11.85)$$

получающегося с помощью подстановок из выражения (11.80); отсюда следует

$$\varepsilon = \frac{2\alpha(1-P)}{3w}. \quad (11.86)$$

Этот результат справедлив только при малых значениях α , так как мы предположили, что ε мало. Окончательно

$$E = -\alpha - \frac{\alpha^2(1-P)^2}{3w}. \quad (11.87)$$

Таким образом, наш метод дает поправку даже для малых значений α . Поправка будет минимальна при $w = 3$, и в этом случае

$$E = -\alpha - \frac{\alpha^2}{81} = -\alpha - 1,23 \left(\frac{\alpha}{10} \right)^2. \quad (11.88)$$

Последнее выражение слабо зависит от w ; например при $w = 1$ коэффициент 1,23 уменьшается только до 0,98. Метод Ли и Пайнса [10] дает в этом приближении точно такой же результат, что и выражение (11.88). Разложение по теории возмущений до членов второго порядка было сделано Хага [11], который показал, что истинное значение коэффициента при члене $(\alpha/10)^2$ должно быть 1,26, так что наш вариационный метод очень точен при малых α .

Противоположный предел при больших значениях α соответствует большим v и, как мы увидим, значениям w порядка единицы. Так как $v \gg w$, то в первом приближении интеграл в выражении (11.75) переходит в формулу (11.81), асимптотику которой можно использовать без вычислений. Следующее приближение по w можно получить, разложив радикал в выражении (11.75), при условии $w/v \ll 1$. Кроме того, пренебрежимо малым оказывается член $e^{-v\tau}$. В этом случае

$$E = \frac{3}{4v} (v-w)^2 - \alpha \left(\frac{v}{\pi} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{2 \ln 2}{v} - \frac{w^2}{2v} \right). \quad (11.89)$$

В рассматриваемом приближении больших v это выражение минимально при $w = 1$ и $v = (4\alpha^2/9\pi) - (41n^2 - 1)$; тогда (см. [12])

$$E = -\frac{\alpha}{3\pi} - 3 \ln 2 - \frac{3}{4} = -0,1061\alpha^2 - 2,83. \quad (11.90)$$

Эти приближения не определяют верхнего предела E , так как, к сожалению, последующие члены будут порядка $1/\alpha^2$ и, по-видимому, являются положительными.

Детальный численный расчет, основанный на этом приближении, был выполнен Шульцем [13]. С помощью счетной машины Шульц вычислил значения v и w , которые дают минимум E для различных значений α ; он вычислил также энергию E и сравнил полученную величину со значениями, полученными в различных теориях. В частности, он вычислил собственное значение энергии в теориях Ли, Лоу и Пайнса [14] (E_{lp}), в теориях Ли и Пайнса [10] (E_{lp}), Гросса [15] (E_g), Пекара [16], Боголюбова [17] и Тябликова [18] (E_{pbt}).

В табл. 2, позаимствованной из работы Шульца [13], приведены результаты вычислений α , v и w , а также значения энергий из теории Фейнмана (E_f) и других теорий. В этой таблице предполагается, что ω и $\hbar$ равны единице. Отметим, что для всех значений α величина энергии в теории Фейнмана меньше, чем во всех других теориях.

Таблица 2

α	3	5	7	9	11
v	3,44	4,02	5,81	9,85	15,5
w	2,55	2,13	1,60	1,28	1,15
E_f	-3,1333	-5,4401	-8,1127	-11,486	-15,710
E_{lp}	-3,10	-5,30	-7,58	-9,95	-12,41
E_g	-3,09	-5,24	-7,43	-9,65	-11,88
E_{pbt}			-6,83	-10,31	-14,7

ДРУГИЕ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

В предыдущих главах мы видели, как применяются интегралы по траекториям для решения задач квантовой механики, которые по своей физической природе являются вероятностными задачами. Кроме того, мы пользовались этим методом для анализа некоторых проблем статистической механики, вероятностная природа которой делает метод интегралов по траекториям особенно эффективным. Можно расширить круг конкретных применений этого метода на широкий класс задач теории вероятностей.

Целью данной главы является рассмотрение нескольких таких задач. Эти задачи разбиваются на два типа. Во-первых, мы обсудим непосредственное приложение метода интегрирования по траекториям к классическим задачам теории вероятностей. Это отличает данную главу от предыдущих, где все применения относились к квантовой механике. Во-вторых, рассмотрим смешанные вероятностные и квантовомеханические задачи. Мы не можем в этой главе углубляться в детали и ограничимся только некоторыми примерами постановки отдельных задач, предоставляя читателю самостоятельно разобрать другие применения метода интегрирования по траекториям.

Основное достоинство метода интегрирования по траекториям состоит в том, что он непосредственно содержит представление о вероятности некоторой траектории или функции. Для пояснения этой мысли последовательно рассмотрим хорошо известные понятия теории вероятности в применении к дискретным и непрерывным переменным ¹⁾.

§ 1. Случайные события

Для начала предположим, что перед нами стоит задача теории вероятности, в которой переменные принимают дискретные значения. Пусть в случайно выбранные моменты времени происходит ряд дискретных событий; это может быть, например, прохождение космических частиц через счетчик или падение дождевых капель на выделенную для наблюдений площадку. Хотя известно, что частицы появляются в случайные моменты времени, однако мож-

¹⁾ Предполагаем, что читатель знаком с основными понятиями обычной теории вероятностей (см. например, [19]).

но ожидать, что в течение любого достаточно длительного промежутка времени T будут наблюдаться $\bar{n} = T\mu$ частиц. Таким образом, μ имеет смысл средней скорости счета.

Конечно, при любом реальном измерении точное число зарегистрированных частиц n , вообще говоря, не будет совпадать с их средним числом. Однако можно спросить, какова вероятность наблюдения некоторого числа n частиц за время, в течение которого в среднем появляются $\bar{n}$ частиц. Ответ дается распределением Пуассона

$$P_n = \frac{\bar{n}^n}{n! e^{\bar{n}}}. \quad (12.1)$$

С другой стороны, можно интересоваться вероятностными вопросами иного типа. Например, какова вероятность того, что после появления предыдущей частицы следующая появится в момент t ? На вопрос, сформулированный таким образом, не существует правильного ответа. Если же мы поинтересовались бы вероятностью того, что интервал между появлениями частиц будет равен или больше t , то ответ $e^{-\mu t}$ мог бы быть получен. Это значит, что можно определить лишь, находится ли момент t внутри некоторого временного интервала. Таким образом, если нас интересует конкретный момент t , то должны исходить из бесконечно малого интервала и формулировать вопрос следующим образом: какова (бесконечно малая) вероятность того, что промежуток времени между двумя событиями будет лежать внутри окрестности dt , окружающей момент t ? Ответ записывается в виде

$$P(t) dt = \mu e^{-\mu t} dt. \quad (12.2)$$

Так приходим к понятию распределения вероятности для непрерывной переменной: $P(t)$ есть отнесенная к единице измерения t вероятность того, что интервал между событиями равен t . Запишем распределение вероятности для x как $P(x)$, если $P(x) dx$ представляет вероятность того, что переменная находится в окрестности dx точки x . Можно легко распространить это определение на случай двух переменных и написать вероятность распределения x и y как $P(x, y) dx dy$. При этом мы подразумеваем, что вероятность найти переменные x и y в области R плоскости xy дается интегралом $\int_R P(x, y) dx dy$.

Хотелось бы расширить концепцию вероятности еще дальше. Желательно рассматривать распределения не только отдельных переменных, но также и целых кривых, т. е. хотелось бы построить вероятностные функции, или, точнее, функционалы, которые позволяют ответить на вопрос: какова вероятность какой-либо конкретной эволюции физического процесса, развивающегося во време-

ни, например напряжения на вольтметре или цены на товар, или, в случае двух переменных, какова вероятность формы поверхности моря как функции широты и долготы? Все это приводит нас к необходимости рассмотреть *вероятность некоторой функции*.

Запишем это так. Вероятность наблюдения функции $f(t)$ есть функционал $P[f(t)]$. При этом следует помнить, что вопросы относительно такой вероятности имеют смысл, только если определить интервал, внутри которого мы ищем определенную функцию. Так же, как в приведенном выше примере, мы должны были спросить: какова вероятность найти конец временного промежутка внутри интервала dt ? Теперь аналогично следует спрашивать: какова вероятность найти функцию в пределах некоторого более или менее ограниченного класса функций (например, среди кривых, заключенных между точками a и b) в течение всего времени интересующего нас хода событий? Если мы назовем такую совокупность функций классом A и спросим, какова вероятность найти функцию $f(t)$ в классе A , то ответ записывается в виде интеграла по траекториям

$$\int_A P[f(t)] \mathcal{D}f(t), \quad (12.3)$$

где интегрирование проведено по всем функциям класса A .

Это выражение можно осмыслить по аналогии с функцией вероятности для нескольких переменных. Вообразим, что точками $t_1, t_2, \dots$ время разбито на дискретные интервалы (как мы это делали в гл. 2, когда только что определили интегралы по траекториям). Тогда значения функции в избранных временных точках $f(t_1), f(t_2), \dots = f_1, f_2, \dots$ аналогичны аргументам функции распределения многих переменных. Вероятность обнаружения заданной кривой можно понимать теперь как вероятность получения заданной системы величин $f_1, f_2, \dots$ в интервале $df_1, df_2, \dots$, т. е. $P(f_1, f_2, \dots) df_1 df_2, \dots$. Если затем перейти к пределу, устремляя число дискретных интервалов времени к бесконечности, то получим вероятность обнаружения непрерывной кривой $f(t)$ в интервале $\mathcal{D}f(t)$, стоящую под знаком интеграла по траекториям в выражении (12.3). Определенный таким образом функционал вероятности и соответствующий вероятностный подход мы будем использовать далее в этой главе.

§ 2. Характеристические функции

Полезно и дальше использовать аналогию между функционалом вероятности траектории и более привычной функцией распределения. Оба эти подхода имеют некоторые общие понятия, например понятие среднего значения. В случае обычных функций распре-

деления дискретных величин, когда вероятность обнаружения некоторого числа n равна P_n , среднее значение определяется как

$$\bar{n} = \sum_{n=1}^{\infty} n P_n. \quad (12.4)$$

Для непрерывно распределенных переменных

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx. \quad (12.5)$$

Аналогичным образом среднее значение функционала $Q[f(t)]$ определим как

$$\langle Q \rangle = \frac{\int Q[f(t)] P[f(t)] \mathcal{Z}f(t)}{\int P[f(t)] \mathcal{Z}f(t)}. \quad (12.6)$$

В последнем соотношении, как и в гл. 7, мы включили в знаменатель интеграл по траекториям, который напоминает нам, что мы всегда должны иметь дело с проблемой нормировки. В принципе можно было бы с самого начала вычислить интеграл по траекториям от функции распределения, приравняв его единице и определить нормировочную постоянную. Однако во многих практических случаях удобнее оставлять функцию ненормированной, просто сокращая числовые множители в числителе и знаменателе выражения, которые сами по себе могут оказаться крайне сложными для вычисления.

Средний квадрат функции в заданный момент времени, например при $t = a$, так же как и среднее значение функции, можно выразить через интегралы по траекториям. В этом случае получается функционал

$$\langle [f(a)]^2 \rangle = \frac{\int [f(a)]^2 P[f(t)] \mathcal{Z}f(t)}{\int P[f(t)] \mathcal{Z}f(t)}. \quad (12.7)$$

Одним из наиболее важных случаев усреднения функций согласно (12.5) является вычисление среднего значения e^{ikx} . Это среднее значение называется характеристической функцией и равно

$$\varphi(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} P(x) dx. \quad (12.8)$$

Иногда эту функцию называют также производящей функцией для моментов. Она представляет собой просто преобразования Фурье для $P(x)$ и очень полезна для оценки различных характеристик распределения, так как ее наличие эквивалентно заданию

самой функции распределения. Последнее вытекает из возможности выполнить обратное преобразование

$$P(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \varphi(k) dk. \quad (12.9)$$

Некоторые важные параметры этого распределения можно определить, вычисляя производные характеристической функции. Так, например, среднее значение x равно

$$\langle x \rangle = -i \frac{d\varphi(k)}{dk} \Big|_{k=0}, \quad (12.10)$$

что легко показать, дифференцируя обе части равенства (12.8) по k и полагая затем $k = 0$. В самом деле, существует последовательность соотношений

$$\varphi(0) = 1, \quad \varphi'(0) = i \langle x \rangle, \quad \varphi''(0) = -\langle x^2 \rangle, \quad \dots \quad (12.11)$$

Следующий наш шаг состоит в обобщении понятия характеристической функции на случай функционального распределения. Математическое определение такой характеристической функции можно построить, снова возвращаясь к нашей картине дискретных интервалов времени; затем нужно выполнить преобразование Фурье для функции распределения большого числа переменных, используя ядро $\exp(ik_1 f_1) \exp(ik_2 f_2) \dots$. При переходе к пределу бесконечного разбиения временных интервалов ядро превращается просто в $\exp[i \int k(t) f(t) dt]$. Это и есть функционал, среднее значение которого мы хотим вычислить для построения *характеристического функционала*. Используя равенство (12.6), получаем

$$\Phi[k(t)] = \frac{\int e^{i \int k(t) f(t) dt} P[f(t)] \mathcal{D}f(t)}{\int P[f(t)] \mathcal{D}f(t)}. \quad (12.12)$$

Этот характеристический функционал также обладает важными специальными свойствами. Например, $\Phi(0) = 1$, а среднее значение функции $f(t)$, вычисляемое в некоторый момент времени $t = a$, равно

$$\langle f(a) \rangle = -i \frac{\delta}{\delta k(a)} \Phi[k(t)] \Big|_{k(t)=0}, \quad (12.13)$$

где используется функциональная производная, определенная в § 2 гл. 7.

В принципе можно выполнить обратное интегральное преобразование Фурье по траекториям и записать вероятностный функ-

ционал в форме

$$P[f(t)] = \int e^{-i \int k(t)f(t)dt} \Phi[k(t)] \mathcal{D}k(t), \quad (12.14)$$

где интеграл по траекториям берется в пространстве функций k .

Для дальнейшего использования заметим, что если функция $f(t)$ всюду совпадает с некоторой заданной функцией $F(t)$, т. е. $P[f(t)]$ равен нулю для всех $f(t)$, кроме $F(t)$, то характеристическая функция имеет вид

$$\Phi = e^{i \int k(t)F(t)dt}. \quad (12.15)$$

§ 3. Шумы

Используем теперь развитые выше идеи для изучения конкретных примеров и в ходе этого выработаем несколько новых понятий. Пусть мы проводим эксперимент, в котором считаем сигналы некоторого типа, например импульсы, создаваемые космическими лучами в счетчике Гейгера, или импульсы теплового шума в вольтметре. В таких случаях импульсы проявляются не просто как резкие дискретные всплески энергии, а характеризуются нарастанием и спадом потенциала. Внимательное изучение реального изменения потенциала, вызванного такими импульсами, показало бы, что для сигнала, пришедшего в момент t , оно имело бы форму $g(t)$. Точно так же, если бы сигнал приходился на момент $t = t_0$, форма потенциальной кривой была бы $g(t - t_0)$.

Далее предположим, что мы проводим наши измерения в интервале времени T , в течение которого регистрируются импульсы с центрами в моменты $t_1, t_2, \dots, t_n$. Полное изменение потенциала в течение всего эксперимента было бы $\sum_{j=1}^n g(t - t_j)$. Так как нам известно, когда произошли все события, то наша функция распределения просто должна выражать достоверность. Используя равенство (12.15), получаем соответствующую характеристическую функцию

$$\Phi = \exp \left[i \sum_{j=1}^n \int k(t) g(t - t_j) dt \right]. \quad (12.16)$$

Предположим теперь, что до проведения эксперимента мы хотели бы определить вероятность наблюдения вполне определенного изменения потенциала с течением времени. Допустим при этом, что n событий равновероятно распределены по всему интервалу T , т. е. что вероятность события в интервале времени dt равна dt/T . В этом случае характеристическая функция оказы-

вается равной

$$\begin{aligned}\Phi &= \int_0^T \exp \left[i \sum_{j=1}^n k(t) g(t-t_j) dt \right] \frac{dt_1}{T} \frac{dt_2}{T} \dots \frac{dt_n}{T} = \\ &= \left\{ \int_0^T \exp \left[i \int k(t+s) g(t) dt \right] \frac{ds}{T} \right\}^n. \quad (12.17)\end{aligned}$$

Обозначим выражение в скобках через A и запишем результат как A^n .

Если число событий в интервале времени распределяется так, что применимо распределение Пуассона, т. е. наступление любого события не зависит от момента наступления других событий и имеется постоянная скорость μ появления среднего числа событий за единицу времени, то среднее число событий, происходящих за время T , равно $\mu T = \bar{n}$ и характеристическая функция

$$\Phi = \sum_n A^n \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}}. \quad (12.18)$$

Сумма в правой части этого равенства представляет собой разложение экспоненты от $(A - 1)\bar{n}$, так что характеристическую функцию можно записать в виде

$$\begin{aligned}\Phi &= e^{-(1-A)\bar{n}} = \exp \left[-\mu T \left(1 - \int_0^T \left\{ e^{i \int k(t+s) g(t) dt} \right\} \frac{ds}{T} \right) \right] = \\ &= \exp \left[-\mu \int_0^T (1 - e^{i \int k(t+s) g(t) dt}) ds \right]. \quad (12.19)\end{aligned}$$

Таким образом, можно теперь вычислить характеристическую функцию для многих различных случаев. Перейдем к рассмотрению некоторых частных случаев, где можно использовать простые приближения.

Допустим, что сигналы очень слабые, а их среднее число за единицу времени велико. В этом случае $g(t)$ мало и, разлагая экспоненту $\exp \left[i \int k(t+s) g(t) dt \right]$ в степенной ряд, можно аппроксимировать характеристическую функцию выражением

$$\exp \left[i\mu \int_0^T \int_0^T k(t+s) g(t) dt ds \right] = \exp \left[i\mu G \int_0^{2T} k(t) dt \right], \quad (12.20)$$

где через $G = \int g(t) dt$ обозначена площадь сигнала. Это озна-

чает, что характеристическая функция Φ выражается в виде (12.15) с $F(t) = \mu G$ (постоянной, не зависящей от t), а это эквивалентно достоверному утверждению, что $f(t)$ совпадает с μG , или, другими словами, вероятность равна единице при наблюдении функции $f(t) = \mu G$ и равна нулю при наблюдении других функций $f(t)$. Таким образом, совокупность большого числа малых слабых сигналов порождает почти постоянный потенциал, величина которого равна произведению числа сигналов за 1 сек на среднее значение потенциала сигнала.

Перейдем теперь к приближению более высокого порядка и изучим флуктуации около этого постоянного потенциала.

Равенство (12.20) дает первое приближение экспоненты $\exp[i \int k(t+s)g(t)dt]$ в выражении для характеристического функционала (12.19). Допустим теперь, что мы переходим к следующему приближению и учитываем члены второго порядка в виде

$$-\frac{\mu}{2} \iint k(t)g(t-s)dt \int k(t')g(t'-s)dt' ds. \quad (12.21)$$

Чтобы получить более простое выражение, введем функцию, определяющую степень перекрытия двух соседних сигналов,

$$\lambda(\tau) = \int g(t)g(t+\tau)dt. \quad (12.22)$$

Эта подстановка приводит член второго порядка к виду

$$-\frac{\mu}{2} \int_0^T \int_0^T k(t)k(t')\lambda(t-t')dt dt'. \quad (12.23)$$

Характеристический функционал с учетом членов первого и второго порядков приобретает вид

$$\Phi = \exp\left[i\mu G \int k(t)dt\right] \exp\left[-\frac{\mu}{2} \iint k(t)k(t')\lambda(t-t')dt dt'\right]. \quad (12.24)$$

Первый множитель в этом выражении соответствует постоянному среднему уровню шума, который, если иметь в виду импульсы напряжения, можно назвать уровнем постоянного тока. Мы можем при желании пренебречь этим уровнем и интересоваться только изменениями потенциала, сдвинув начало отсчета $f(t)$. Это означает, что путем изменения начала отсчета функции $f(t)$ всегда можно освободиться от множителя $\exp[i \int k(t)F(t)dt]$ [т. е. записать $f(t) = F(t) + f'(t)$, изучить распределение вероятности и характеристический функционал для $f'(t)$]. Если мы

сделаем такое изменение начала отсчета, то будем изучать лишь флуктуации напряжения относительно уровня постоянного тока.

Отметим одно приближение к функционалу (12.24), которое часто оказывается точным. В общем случае $\lambda(\tau)$ — узкая, пикообразная функция от τ . Нарастание и спад формы сигнала $g(t)$ характеризуется конечной шириной, так что если два сигнала разделены достаточно большим промежутком времени, то у них нет области перекрытия. Другими словами, $\lambda(\tau)$ быстро стремится к нулю при увеличении τ . Поэтому, если $\lambda(\tau)$ имеет достаточно узкий профиль, второй член в уравнении (12.24) может быть аппроксимирован выражением

$$e^{-(q/2)\int[h(t)]^2 dt}, \quad (12.25)$$

где обозначено $q = \mu \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\tau$. Это эквивалентно распределению вероятности

$$P[f(t)] = e^{-(q/2)\int[f(t)]^2 dt}. \quad (12.26)$$

Флуктуации, подобные тем, что мы сейчас рассматриваем, часто называют *гауссовым шумом*.

Характеристики функционалов вероятности, описывающих шумовые функции, последнее время широко обсуждались в теории связи, причем многие характеристики шумового спектра были определены и вычислены. Аналогичное рассмотрение проведем здесь и в следующем параграфе, где рассматриваются гауссовы шумы.

Покажем еще на одном примере, как выводятся характеристические функционалы. Рассмотрим сигналы, которые приходят в случайные моменты времени и для которых задана характеристическая форма, например, в виде $u(t)$, но различен масштабный весовой множитель, так что типичный сигнал запишется, как $a u(t)$. Можно также допустить, что вес a может быть либо положительным, либо отрицательным. Пусть сигналы приходят в какие-то моменты времени t_j , а их веса принимают случайные положительные и отрицательные значения a_j . Тогда результирующая функция представляется выражением

$$f(t) = \sum_j a_j u(t - t_j). \quad (12.27)$$

Если отвлечься от случайной природы событий, то мы получим характеристический функционал, эквивалентный функционалу (12.16);

$$\Phi = \exp \left[i \sum_j a_j \int k(t) u(t - t_j) dt \right]. \quad (12.28)$$

Если учесть теперь случайную природу весовых масштабных множителей сигналов и обозначить вероятность обнаружения весового множителя, соответствующего j -му сигналу, в интервале da_j через $p(a_j) da_j$, то характеристический функционал будет иметь вид

$$\Phi = \int \int \dots \exp \left[i \sum_j a_j \int k(t) u(t-t_j) dt \right] \times \\ \times p(a_1) da_1 p(a_2) da_2 \dots \quad (12.29)$$

Конечно, каждая из вероятностных функций для величин a_j обладает соответствующей ей характеристической функцией (или производящей функцией для моментов). Назовем эту функцию $W[\omega]$ и определим ее равенством

$$W[\omega] = \int e^{i\omega a} p(a) da. \quad (12.30)$$

Тогда выражение для Φ можно записать в виде

$$\Phi = \prod_j W \left[\int k(t) u(t-t_j) dt \right]. \quad (12.31)$$

Далее мы можем действовать как при выводе выражения (12.17) и допустить, что моменты появления сигналов случайно распределены по интервалу $0 \leq t \leq T$. Если мы предположим, что в этом интервале имеется точно n импульсов, то получим характеристический функционал

$$\Phi = \left(\frac{\gamma}{T} \right)^n, \quad (12.32)$$

где

$$\gamma = \int W \left[\int k(t) u(t-s) dt \right] ds. \quad (12.33)$$

Если теперь, как и при выводе (12.18), предположить, что распределение числа сигналов во времени описывается функцией Пуассона, то выражение (12.32) надо умножить на $\bar{n}^n e^{-\bar{n}}/n!$, где, как прежде, $\bar{n} = \mu T$ — среднее число сигналов за время T . Суммируя по n , получаем

$$\Phi = e^{-\mu(T-\gamma)} = \exp \left(-\mu \int \left\{ 1 - W \left[\int k(t) u(t-s) dt \right] \right\} ds \right). \quad (12.34)$$

В качестве конкретного примера использования полученного результата рассмотрим очень узкий сигнал. Более того, предположим, что его форму можно аппроксимировать δ -функцией,

т. е. $u(t) = \delta(t)$. Тогда характеристический функционал

$$\Phi = \exp \left(-\mu \int \{1 - W[k(s)]\} ds \right). \quad (12.35)$$

Предположим далее, что весовые множители имеют гауссово распределение с нулевым средним значением и среднеквадратичным отклонением, равным σ ; другими словами, допустим, что эти множители имеют обычное нормальное распределение

$$p(a) da = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-a^2/2\sigma^2} da. \quad (12.36)$$

В этом случае характеристическая функция

$$W[\omega] = e^{-\sigma^2 \omega^2/2} \quad (12.37)$$

приводит к следующему выражению для Φ :

$$\Phi[k(t)] = \exp \left[-\mu \int (1 - e^{-(\sigma^2/2)[k(s)]^2}) ds \right]. \quad (12.38)$$

Итак, мы снова установили, что, выбирая исходные предположения, можно вывести соответствующий характеристический потенциал. На любой стадии вывода допустима обоснованная аппроксимация, сводящая функционал к квадратичному виду. Например, в только что описанном случае малая величина среднеквадратичного масштабного множителя σ соответствует слабым сигналам. Если к тому же среднее число сигналов, приходящихся на временной интервал, велико, то (12.38) достаточно хорошо аппроксимируется выражением

$$\Phi = \exp \left\{ -\frac{\mu \sigma^2}{2} \int [k(t)]^2 dt \right\}. \quad (12.39)$$

Такое распределение называется *белым шумом*.

§ 4. Гауссовы шумы

Распределения с гауссовым характеристическим функционалом встречаются во многих ситуациях; эти распределения мы теперь и рассмотрим.

Нам уже пришлось иметь дело с гауссовыми распределениями, т. е. с экспоненциальными функциями, содержащими в показателе квадраты функций, к которым относится данное распределение. Мы пришли к гауссовым функционалам, сохранив член второго порядка в разложении экспоненты, возникающей как следствие нашего предположения о справедливости распределения Пуассона для случайных событий. Нужно отметить, что некоторые физические процессы в силу своей природы действительно описываются такими функциональными распределениями. В обычной теории

вероятностей нормальное, или гауссово, распределение описывает физические процессы, состоящие из большого числа независимых случайных событий. В этом состоит результат основной предельной теоремы теории вероятностей. Это относится и к вероятностным функционалам и проявляется в том, что во многих важных случаях исследование физических явлений приводит к гауссовым распределениям. Для дальнейшего использования напомним здесь самую общую форму гауссова характеристического функционала:

$$\Phi = \exp \left[i \int k(t) F(t) dt \right] \times \\ \times \exp \left[-\frac{1}{2} \iint k(t) k(t') A(t, t') dt dt' \right]. \quad (12.40)$$

Первый множитель в этом выражении можно устранить сдвигом начала отсчета $f(t)$, как это уже отмечалось при выводе распределения флуктуаций потенциала. Таким образом, можно ввести функцию $f' = f - F(t)$. Кроме того, заметим, что если поведение описываемой системы не зависит от абсолютного значения времени, то ядро $A(t, t')$ должно иметь форму $A(t - t')$.

В конкретных физических задачах вид функции A можно определить либо экспериментально, либо пользуясь приближенной картиной отдельных сторон явления, достаточно близкой к реальной. Приведенный выше вывод шумового спектра дает пример такого приближения. При этом $A(t, t') = \mu\lambda(t - t')$. Во всяком случае, теоремы о поведении системы, получающиеся при использовании этой функции, останутся справедливыми до тех пор, пока квадратичная или гауссова форма (12.40) пригодна для аппроксимации характеристического функционала.

Конечно, теперь мы умеем обращаться с гауссовыми функционалами, так как в предыдущих главах затратили достаточно времени на различные операции с ними. Появление множителя i отличает этот случай от того, что встречается в типичных квантовомеханических задачах. В самом деле, функции, которые были действительными, например, в § 4 гл. 7, являются здесь мнимыми, что, однако, не требует какого-либо пересмотра математического аппарата; это замечание подготовит нас к некоторым различиям в деталях результатов.

Распределение вероятности, соответствующее характеристическому функционалу (12.40), имеет вид

$$P[f(t)] = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \iint [f(t) - F(t)] [f(t') - F(t')] B(t, t') dt dt' \right\}, \quad (12.41)$$

где теперь функция $B(t, t')$ представляет собой ядро, обратное

ядру $A(t, t')$, т. е. функции A и B связаны равенством

$$\int A(t, \tau) B(\tau, s) d\tau = \delta(t - s). \quad (12.42)$$

Задача 12.1. Доказать равенство (12.42).

Все параметры распределения можно вычислить из характеристического функционала методом, изложенным в гл. 7.

Здесь мы изучим более детально некоторые физические характеристики постоянного во времени гауссова шума, т. е. изучим распределения с характеристическим функционалом

$$\Phi = \exp \left[-\frac{1}{2} \int \int k(t) k(t') A(t - t') dt dt' \right]. \quad (12.43)$$

Функция $A(\tau)$ называется корреляционной функцией. Выражение (12.43) означает, что вероятность наблюдения заданной шумовой функции $f(t)$ равна

$$P[f(t)] = \exp \left[-\frac{1}{2} \int \int f(t) f(t') B(t - t') dt dt' \right]. \quad (12.44)$$

В последнем выражении появилась функция B , обратная по отношению к корреляционной функции A . Это означает, что $\int B(t - s) A(s) ds = \delta(t)$ или, если

$$\mathcal{F}(\omega) = \int A(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (12.45)$$

является преобразованием Фурье от функции $A(\tau)$, то преобразование Фурье от функции $B(\tau)$ равно $1/\mathcal{F}(\omega)$.

Мы начнем с численного анализа некоторых свойств этого распределения. Сначала покажем, что среднее значение шумовой функции равно нулю. Как следует из равенства (12.13), среднее значение шума в данный момент времени определяется соотношением

$$\langle f(a) \rangle = -i \frac{\delta\Phi}{\delta k(a)}. \quad (12.46)$$

В этом выражении, согласно § 2 гл. 7, функциональная производная функционала (12.43) равна

$$\frac{\delta\Phi}{\delta k(a)} = \left[-\int k(t) A(t - a) dt \right] \Phi \quad (12.47)$$

и обращается в нуль, если $k(t) = 0$.

Вычислим теперь средний квадрат шумовой функции, или, лучше, среднее значение произведения двух шумовых функций в моменты a и b . Эта величина называется корреляционной функцией шума. Дважды продифференцировав обе части равен-

ства (12.42), имеем

$$\langle f(a) f(b) \rangle = - \frac{\delta^2 \Phi}{\delta k(a) \delta k(b)} = A(b-a) \Phi - \left[\int k(t) A(t-a) dt \right] \left[\int k(t') A(t'-b) dt' \right] \Phi. \quad (12.48)$$

Вычислив это выражение для $k=0$, получим просто $A(b-a)$. Отсюда ясно, почему A называется корреляционной функцией.

§ 5. Спектр шума

Наиболее употребительная характеристика распределения шумов — это спектр их интенсивности (см. задачу 6.26), который определяется как среднее значение квадрата от фурье-образа шумовой функции, т. е. от

$$\varphi(\omega) = \int f(t) e^{i\omega t} dt. \quad (12.49)$$

Используя наши предыдущие результаты, можно найти

$$\begin{aligned} \langle |\varphi(\omega)|^2 \rangle &= \left\langle \int f(a) e^{i\omega a} da \int f(b) e^{-i\omega b} db \right\rangle = \\ &= \iint \langle f(a) f(b) \rangle e^{i\omega(a-b)} da db = \\ &= \iint A(b-a) e^{i\omega(a-b)} da db = \int \mathcal{P}(\omega) d\omega. \end{aligned} \quad (12.50)$$

Здесь мы использовали функцию $\mathcal{P}(\omega)$, фурье-образ корреляционной функции A [см. выражение (12.45)].

Если проинтегрировать в последнем из равенств (12.50), то получится бесконечный результат. Поэтому среднеквадратичную величину, которую мы хотим найти, можно определить лишь для некоторого конечного интервала времени. Если взять единичный интервал времени, то можно сказать, что средняя мощность в расчете на 1 сек

$$\mathcal{P}(\omega) = \text{среднее значение } |\varphi(\omega)|^2. \quad (12.51)$$

Мы можем применить некоторые из этих общих результатов к нашему специальному примеру шума, вызванного множеством малых сигналов. Корреляционная функция в этом случае — это просто функция $\mu\lambda(\tau)$ из формулы (12.22), т. е.

$$A(\tau) = \mu \int g(t) g(t+\tau) d\tau. \quad (12.52)$$

Это означает, что функция мощности, называемая обычно спектром

мощности, так как она определяется частотой, равна

$$\mathcal{P}(\omega) = \mu \int g(t) g(t + \tau) e^{i\omega\tau} d\tau dt = \mu |\gamma(\omega)|^2, \quad (12.53)$$

где $\gamma(\omega)$ — фурье-образ функции сигнала $g(t)$. В нашем случае этот простой результат можно истолковать непосредственно. Если сигналы приходят в моменты t_i , так что $f(t) = \sum_i g(t - t_i)$, то фурье-образ $f(t)$ равен

$$\varphi(\omega) = \sum_i \gamma(\omega) e^{i\omega t_i}.$$

Таким образом, среднее значение квадрата $\varphi(\omega)$

$$\langle |\varphi(\omega)|^2 \rangle = \left| \sum_{i,j} \gamma(\omega) \gamma^*(\omega) e^{i\omega(t_i - t_j)} \right|. \quad (12.54)$$

А так как моменты t_i случайны и независимы от t_j для $j \neq i$, то при усреднении ни один из членов с $i \neq j$ не дает вклада, так как среднее значение $\exp[i\omega(t_i - t_j)]$ равно нулю: остаются только члены с $i = j$. Каждый из них равен $|\gamma(\omega)|^2$, а общее их число μT , так что средняя величина $|\varphi(\omega)|^2$ в расчете на 1 сек равна $\mu |\gamma(\omega)|^2$.

В частном случае, когда характеристическую функцию можно аппроксимировать функцией белого шума из (12.25), $A(t - t') = \text{const } \delta(t - t')$. Это означает, что $\mathcal{P}(\omega)$ не зависит от ω и при всех частотах на единичный интервал частоты приходится одинаковая «мощность» [средняя величина $|\varphi(\omega)|^2$ в расчете на 1 сек].

Рассматриваемые распределения очень удобно описывать, задавая распределение вероятности не для $f(t)$, а прямо для ее фурье-образа $\varphi(\omega)$ и выражая характеристический функционал не через $k(t)$, а через его фурье-образ $K(\omega)$:

$$K(\omega) = \int k(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (12.55)$$

Используя это представление, можно записать характеристический функционал для распределения шума, соответствующего равенству (12.43), в следующей форме:

$$\Phi = e^{-1/2 \int |K(\omega)|^2 \mathcal{P}(\omega) d\omega / 2\pi}, \quad (12.56)$$

где выражение, обратное (12.55), подставлено непосредственно в (12.43). При этом функционалу (12.56) соответствует вероятностный функционал

$$P = e^{-1/2 \int |\varphi(\omega)|^2 [1/\mathcal{P}(\omega)] d\omega / 2\pi}. \quad (12.57)$$

Этот результат можно получить непосредственно из выражения

12.56). Для этого заметим, что

$$e^{i \int h(t)f(t)dt} = e^{i \int K(\omega)\Phi(\omega)d\omega/2\pi}. \quad (12.58)$$

Тогда в соответствии с определением (12.14) получим

$$P = \int \Phi e^{-i \int K(\omega)\Phi(\omega)d\omega/2\pi} \mathcal{D}K(\omega). \quad (12.59)$$

Если теперь допустить, что возможны лишь дискретные значения ω , разделенные бесконечно малыми интервалами Δ , то интегралы в показателе экспоненты (12.56) и (12.57) можно заменить суммами Римана. При этом наши интегралы по траекториям примут вид

$$P = \prod_{\omega} \int e^{-(\Delta/2)|K(\omega)|^2 \mathcal{P}(\omega)} e^{i \Delta K(\omega)\Phi(\omega)} dK(\omega). \quad (12.60)$$

Интеграл при каждом значении ω вычисляется независимо (выделением полного квадрата). В результате имеем

$$\prod_{\omega} e^{\frac{-(\Delta/2)|\Phi(\omega)|^2}{\mathcal{P}(\omega)}}. \quad (12.61)$$

Объединив отдельные множители в этом произведении, получим функционал (12.57). Ясно, что все происходящее на одной частоте не зависит от происходящего на других частотах, а величина сигнала с частотой ω , $\Phi(\omega)$, распределяется по гауссову закону со средним квадратом, пропорциональным $\mathcal{P}(\omega)$.

§ 6. Броуновское движение

Как правило, метод интегралов по траекториям на практике не облегчает решение задачи, если она не может быть решена другим способом. Тем не менее каждый, кто до сих пор следил за нашими рассуждениями и знаком с интегралами по траекториям, признает этот способ выражения очень простым, если дело касается вероятностных задач.

Рассмотрим влияние броуновского движения на некоторую линейную систему, например гармонический осциллятор с затуханием, возбуждаемый случайно изменяющейся силой $f(t)$. Допустим, что масса осциллятора равна единице. В этом случае необходимо решить уравнение

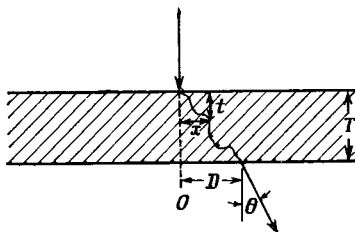
$$\ddot{x} - \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = f(t), \quad (12.62)$$

где $x(t)$ — координата осциллятора. Если функция $f(t)$ определяется заданным распределением вероятности $P_f[f(t)]$, то каким окажется вероятностное распределение $P_x[x(t)]$ для различных

возможных траекторий $x(t)$? Уравнение (12.62) связывает координату x и силу f , т. е. для каждого значения $f(t)$ существует $x(t)$. Следовательно, вероятность обнаружить заданную функцию x такова же, что и вероятность соответствующей функции f , т. е.

$$P_x[x(t)] \mathcal{D}x(t) = P_f[f(t)] \mathcal{D}f(t), \quad (12.63)$$

где величина x связана с f уравнением (12.62). В общем случае нужно быть осторожным при переходе от $\mathcal{D}x(t)$ и $\mathcal{D}f(t)$, так как



Ф и г. 12.1. Движение быстрой частицы перпендикулярно пластинке вещества толщиной T .

Пройдя толщину t в направлении первоначального движения, быстрая частица вследствие взаимодействий с ядрами вещества отклоняется на расстояние x . В конце концов она вылетает из пластинки на расстоянии D от точки $x=0$, в которой она вылетела бы при отсутствии взаимодействий, и движется под углом θ к первоначальному направлению.

тут существует зависимость, аналогичная якобиану преобразования элементарных объемов. Однако если f и x связаны линейно (как это имеет место в нашем случае), то этот якобиан равен константе. Таким образом, как и в обычном методе интегралов по траекториям, если имеется уверенность в возможности нормировать результат, то

$$P_x[x(t)] = \text{const } P_f(\ddot{x} - \dot{\gamma}x + \omega_0^2 x), \quad (12.64)$$

что дает формальное решение нашей задачи. Если P_f представляет собой гауссово распределение, то и P_x имеет такой же вид. В этом случае задача может быть решена многими способами, причем самый очевидный из них — разложение в ряд Фурье при условии, что ω_0^2 и γ не зависят от времени.

Многие задачи в какой-то степени можно поставить и частично решить, исходя из уравнения (12.64). Рассмотрим конкретный пример. Быстрая частица пролетает сквозь вещество и вблизи ядер претерпевает резкие, но небольшие по величине изменения скорости. Какова вероятность того, что, пройдя толщину T , частица отклонится на расстояние D от первоначальной прямолинейной траектории и будет двигаться под углом θ к ней, как это показано на фиг. 12.1?

Предположим, что взаимодействие не приводит к заметному уменьшению продольной скорости частицы и вещество, сквозь которое проходит частица, однородно. Далее, допустим, что угол θ всегда мал и что движение представляет собой результат очень большого числа взаимодействий, каждое из которых дает малый эффект. Допустим также, что среднее число столкновений в слое бесконечно малой толщины dt равно μ и что в каждом столкновении происходит отклонение на угол Δ , определяемый распределением вероятности $p(\Delta) d\Delta$; пусть этому распределению соответствует среднеквадратичное отклонение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 p(\Delta) d\Delta = \sigma^2 \quad (12.65)$$

(мы будем обозначать $\mu\sigma^2$ через R).

Ограничимся изучением проекции движения на двумерную плоскость, содержащую первоначальный путь частицы. Движение в плоскости, перпендикулярной ей, будет происходить аналогично, а движение в любой из плоскостей можно рассматривать независимо друг от друга. Обозначим через t глубину проникновения частицы в пластинку; пусть θ — угол мгновенного направления движения в рассматриваемой плоскости, а x — отклонение частицы от первоначальной траектории, как указано на фиг. 12.1. Эти параметры связаны соотношением $dx = \theta dt$ или $\dot{x} = \theta$.

Мы предполагаем, что отклонения частицы на угол Δ происходят внезапно, так что $\dot{\theta} = f(t)$, где функция f представляется суммой δ -функций со случайными значениями времени и случайными относительными коэффициентами. Это означает, что $\ddot{x} = f(t)$ и $P_f[f(t)]$ обладает характеристическим функционалом

$$\Phi = \exp \left(-\mu \int \{1 - W[k(s)]\} ds \right), \quad (12.66)$$

где

$$W[\omega] = \int p(\Delta) e^{i\omega\Delta} d\Delta. \quad (12.67)$$

Заметим, что среднее значение углового отклонения Δ считается равным нулю, а сами эти отклонения предполагаются малыми. Если теперь разложить $G(\omega)$, так что

$$W[\omega] = \int p(\Delta) \left(1 + i\omega\Delta - \frac{\omega^2}{2} \Delta^2 + \dots \right) d\Delta, \quad (12.68)$$

и ограничиться только членами не выше второго порядка по Δ , т. е. положить $W[\omega] = 1 - \omega^2\sigma^2/2$, то функционал (12.66) будет

иметь вид

$$\Phi = \exp \left\{ -\frac{1}{2} R \int [k(s)]^2 ds \right\}. \quad (12.69)$$

А это в свою очередь означает, что

$$P_f[f(t)] = \exp \left\{ -\frac{1}{2R} \int [f(t)]^2 dt \right\} \quad (12.70)$$

и, следовательно,

$$P_x[x(t)] = \text{const} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2R} \int_0^T [\ddot{x}(t)]^2 dt \right\}. \quad (12.71)$$

Мы должны вычислить распределение $P(D, \theta)$, определяющее вероятность того, что частица будет выходить из пластины под углом θ и смещением D , если при входе в пластину она имела $x(0) = 0$ и $\dot{x}(0) = 0$. Нас интересует не точная траектория частицы в веществе, а только условия выхода $x(T) = D$ и $\dot{x}(T) = \theta$. Поэтому выразим искомое распределение в виде интеграла по всем траекториям:

$$P(D, \theta) = \int \exp \left(-\frac{1}{2R} \int_0^T \ddot{x}^2 dt \right) \mathcal{D}x(t), \quad (12.72)$$

где все траектории, по которым берется интеграл, удовлетворяют предполагаемым граничным условиям. Этот интеграл гауссовой формы можно вычислить методами, развитыми в § 5 гл. 3. Он имеет экстремум для траектории

$$\ddot{\ddot{x}}(t) = 0. \quad (12.73)$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее нашим граничным условиям, имеет вид

$$x(t) = (3D - \theta T) \left(\frac{t}{T} \right)^2 + (\theta T - 2D) \left(\frac{t}{T} \right)^3. \quad (12.74)$$

Подставив его в показатель экспоненты в (12.72), получим

$$\frac{1}{2R} \int_0^T \ddot{x}^2 dt = \frac{6}{RT^3} \left(D - \frac{\theta T}{2} \right)^2 + \frac{\theta^2}{2RT}. \quad (12.75)$$

Отсюда следует искомое распределение

$$P(D, \theta) = \text{const} \cdot \exp \left[-\frac{6}{RT^3} \left(D - \frac{\theta T}{2} \right)^2 - \frac{\theta^2}{2RT} \right]. \quad (12.76)$$

На практике в некоторых случаях для нас может представлять интерес не точное линейное смещение частицы от предполагаемой

начальной точки, а угол θ , под которым частица вылетает из пластины. Обладая полной функцией распределения (12.76), легко вычислить функцию распределения углов, проинтегрировав по всем значениям D . Результат равен $\exp[-(\theta^2/2RT)]$. Этого можно было ожидать, поскольку мы уже предположили, что среднеквадратичный угол отклонения при прохождении единичной толщины равен R , так что эта же величина для полной толщины T должна быть RT .

Предположим теперь, что мы наблюдаем только частицы, вылетающие под фиксированным углом θ , и рассмотрим для этих частиц функцию распределения по положениям точек вылета D . Найдем, что распределение вероятностей имеет максимум при $D = \theta T/2$. Этого можно было бы ожидать, если бы конечный угол отклонения θ нарастал пропорционально толщине пластины; тогда среднее значение угла во время пролета через пластину было бы равным $\theta/2$.

Задача 12.2. Покажите, что нормировочный коэффициент для функции распределения $P(D, \theta) dD d\theta$ равен

$$\sqrt{\frac{6}{\pi RT^3}} \sqrt{\frac{1}{2\pi RT}}. \quad (12.77)$$

§ 7. Квантовая механика

В этом и следующих параграфах нам хотелось бы посмотреть, как формулируются статистические задачи в квантовой механике. Вероятности неотделимы от квантовой механики, так как даже объект, находящийся в известном состоянии, одновременно с некоторой вероятностью находится в других состояниях. Кроме того, неопределенность может вноситься извне. Например, исходное состояние объекта само может быть задано с какой-то вероятностью. Такая ситуация аналогична ситуации в классической механике, в которой неизвестны начальные условия, а задано лишь распределение вероятностей для таких условий. В классической механике мы уже сталкивались с подобной проблемой, но это был сугубо частный случай, когда состояние с энергией E имеет соответствующую вероятность $e^{-E/kT}$. Здесь мы рассмотрим более общую картину.

Пусть квантовомеханическая система находится под влиянием заданного внешнего потенциала $V(t)$. Что можно сказать, если потенциал описывается распределением вероятностей $P[V(t)] \mathcal{D}V(t)$? Нужно ли нам в действительности решать задачу для каждого потенциала $V(t)$ и затем усреднять, или же имеется способ сформулировать задачу уже *после* усреднения по $V(t)$? Хотелось бы надеяться, что это именно так, потому что

часто оказывается намного легче решить статистическую задачу после предварительного усреднения, чем искать общее решение первоначальной задачи с очень большим числом условий. В этом параграфе покажем, что такая формулировка действительно возможна. После этого рассмотрим случай, когда квантовомеханическая система возмущается не классической, а некоторой другой статистически неопределенной квантовой системой.

Основная цель этой главы — показать, как можно сформулировать эти и другие подобные вопросы. Мы не будем заниматься детальным решением упомянутых частных задач; они нужны нам лишь для того, чтобы помочь понять способы постановки более общих проблем.

Прежде всего обсудим аналогию броуновского движения для квантовомеханической системы, т. е. предположим, что квантовая система, которой соответствует невозмущенное действие $S(q)$, испытывает влияние внешнего потенциала $V(t)$ и при этом действие S становится равным ¹⁾

$$S_V(q) = S(q) + \int q(t) V(t) dt. \quad (12.78)$$

Допустим, что нас интересует вопрос: какова вероятность того, что, отправившись в начальный момент времени t_i из точки $q(t_i) = q_i$, мы достигнем в конечный момент t_f положения q_f ? Эта вероятность определяется квадратом амплитуды $|K(q_f, t_f; q_i, t_i)|^2$. Если начальное состояние системы задается волновой функцией $\varphi(q)$, а конечное — волновой функцией $\chi(q)$, то вероятность перехода между этими состояниями

$$\begin{aligned} P[\chi(q); \varphi(q)] &= \left| \int \int \chi^*(q_f) K(q_f, t_f; q_i, t_i) \varphi(q_i) dq_f dq_i \right|^2 = \\ &= \int \int \int \int \chi^*(q_f) \chi(q'_f) K(q_f, t_f; q_i, t_i) K^*(q'_f, t_f; q'_i, t_i) \times \\ &\quad \times \varphi(q_i) \varphi^*(q'_i) dq_i dq'_i dq_f dq'_f. \end{aligned} \quad (12.79)$$

Очевидно, что все подобные задачи могут быть решены, если вычислить произведение

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) K^*(q'_f, t_f; q'_i, t_i). \quad (12.80)$$

Здесь первый множитель содержит интеграл по траекториям $\int \exp \{iS[q(t)]\} \mathcal{D}q(t)$, тогда как второй, комплексно-сопря-

¹⁾ Все операции мы сделаем так, как если бы аргументом была только одна координата q . Читатель может непосредственно получить обобщение на случай нескольких координат q_i (при этом V заменяется набором потенциалов V_i) и на случай, когда коэффициент при $V(t)$ в действии S_V не равен просто q , а является более сложным оператором.

женный¹⁾, включает $\int \exp \{ -iS[q(t)] \} \mathcal{D}q(t)$. Каждый из интегралов взят по траекториям с заданными конечными точками. Во втором интеграле выражения (12.80) обозначим переменную интегрирования по траектории через $q'(t)$. При этом произведение (12.80) можно выразить как *двойной интеграл по траекториям*:

$$\iint e^{iS[q(t)] - iS[q'(t)]} \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}q'(t). \quad (12.81)$$

Суммирование таких интегралов по различным конечным точкам даст искомую вероятность.

Если потенциал V отличен от нуля, то мы должны S в выражении (12.81) заменить на S_V . При этом получим

$$\iint \exp \left(i \left\{ S[q(t)] - S[q'(t)] + \int q(t) V(t) dt - \int q'(t) V(t) dt \right\} \right) \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}q'(t). \quad (12.82)$$

Предположим теперь, что потенциал известен только в вероятностном смысле, т. е. задана вероятность $P_V[V(t)] \mathcal{D}V(t)$ того, что потенциал равен $V(t)$. Тогда для того, чтобы получить вероятность перехода между состояниями φ и χ , нужно взять выражение (12.79), рассчитанное для данного $V(t)$, и усреднить его по всем $V(t)$ с весом $P_V[V(t)] \mathcal{D}V(t)$. Это даст

вероятность $(\varphi \rightarrow \chi) =$

$$= \iiint \chi^*(q_f) \chi(q'_f) J(q_f, q'_f; q_i, q'_i) \varphi(q_i) \varphi^*(q'_i) dq_i dq'_i dq_f dq'_f, \quad (12.83)$$

где J — среднее от выражения (12.82) по всем $V(t)$ с весом $P_V[V(t)] \mathcal{D}V(t)$; таким образом,

$$J = \iint \exp(i\{S[q(t)] - S[q'(t)]\}) \times \\ \times \exp\left(i \int [q(t) - q'(t)] V(t) dt\right) P_V[V(t)] \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}q'(t) \mathcal{D}V(t), \quad (12.84)$$

где интегралы берутся между заданными конечными точками $q(t_i) = q_i$, $q'(t_i) = q'_i$, $q(t_f) = q_f$, $q'(t_f) = q'_f$. Заметим, что выбор граничных точек и интегрирование по различным переменным с учетом распределения волновых функций, зависящего

¹⁾ Как и в гл. 11, предполагаем, что $\hbar = 1$, а $S[q(t)]$ — действительная величина.

от вида задачи [как в выражении (12.83)], дает только сумму J для разных граничных условий. Здесь и дальше мы будем рассуждать таким образом, будто уже само J дает нам искомую вероятность, причем читателю не следует забывать, что эту работу еще нужно выполнить. А теперь можно сконцентрироваться на главном — вычислении двойных интегралов по траекториям, необходимых для расчета J .

Интеграл по $V(t)$ в формуле (12.84) можно получить явно. Видно, что для нахождения вероятностей после усреднения надо вычислить двойной интеграл:

$$J = \iint \exp(i\{S[q(t)] - S[q'(t)]\}) \Phi[q(t) - q'(t)] \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}q'(t), \quad (12.85)$$

где $\Phi[k(t)]$ — производящий функционал, принадлежащий распределению вероятностей P_V , так что

$$\Phi[k(t)] \int e^{i \int k(t)V(t)dt} P_V[V(t)] \mathcal{D}V(t). \quad (12.86)$$

Выражение (12.85) соответствует нашему стремлению выразить ответ в форме, справедливой и после усреднения. В него входит вычисление двойного интеграла по траекториям. Как его вычислить практически, — другой вопрос. В этих параграфах мы рассматриваем лишь возможную постановку различных задач; методы, обсуждаемые здесь, могут оказаться полезными в приложениях.

В качестве примера применения выражения (12.85) предположим, что $V(t)$ — гауссов шум с нулевым средним значением и характеристической функцией $A(t, t')$, как в выражении (12.46). Нужно вычислить двойной интеграл:

$$\begin{aligned} J = & \iint \exp i\{S[q(t)] - S[q'(t)]\} \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \iint [q(t) - q'(t)][q(t') - q'(t')] A(t, t') dt dt' \right\} \times \\ & \times \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}q'(t). \end{aligned} \quad (12.87)$$

Так как во всяком случае либо новый множитель содержит q , либо q' входят в новый экспоненциальный множитель только квадратично, то могут быть полезны некоторые методы, обсуждавшиеся ранее для квадратичных форм. Конечно, если действие $S(q)$ само квадратично, как в случае гармонического осциллятора, то интегралы по траекториям можно вычислить точно, используя методы §5 гл. 3.

§ 8. Функционалы влияния

Рассмотрим теперь поведение квантовомеханической системы, обобщенную координату которой мы будем обозначать через q , во взаимодействии с другой системой, характеризуемой обобщенной координатой Q ¹⁾. Допустим, что все предполагаемые измерения должны проводиться в системе q и никакие прямые измерения не будут сделаны в системе Q . Например, мы интересуемся переходами в атоме, который находится в электромагнитном поле и может излучать. Тогда исследуем только состояние атома и не будем непосредственно измерять его излучение; в этом случае q — атомные координаты, а Q — координаты поля. Если же мы проводим исследование иначе, т. е. наблюдаем только излучение атома, испускаемое, поглощаемое или рассеиваемое, но не измеряем никаких величин, непосредственно описывающих атом, то можно опираться на наш предыдущий анализ, причем теперь Q — атомные координаты, а q — координаты электромагнитного поля. Если, например, нам хочется рассмотреть теорию коэффициента преломления, то q — снова переменные поля, а переменные Q описывают тело, через которое проходит свет. В качестве еще одного примера предположим, что нужно исследовать поведение электрона в кристалле (или иона в жидкости), причем экспериментальные данные относятся только к положению заряда, но не к материалу кристалла. Например, можно было бы интересоваться током (или скоростью электронов), возникающим при определенных условиях, и не рассматривать его связи с числом индуцированных фононов. Тогда переменные q будут описывать электрон, а переменные Q — все другие параметры вещества в кристалле.

Пусть $S[q(t)]$ — действие для системы q , $S_0[Q(t)]$ — действие для окружающей среды, а $S_{\text{взаим}}[q(t), Q(t)]$ описывает взаимодействие между средой Q и системой q . Действие для всей системы равно сумме $S[q(t)] + S_0[Q(t)] + S_{\text{взаим}}[q(t), Q(t)]$, а вероятность какого-либо события в такой сложной системе можно вычислить из двойного интеграла по траекториям, являющегося, очевидно, обобщением выражения (12.81), которое теперь запишется в виде

$$J = \int \int \exp \{ i \{ S[q(t)] - S[q'(t)] + S_{\text{взаим}}[q(t), Q(t)] - S_{\text{взаим}}[q'(t), Q'(t)] + S_0[Q(t)] - S_0[Q'(t)] \} \} \times \\ \times \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}Q(t) \mathcal{D}q'(t) \mathcal{D}Q'(t). \quad (12.88)$$

¹⁾ Q обозначает любое число координат. Эта система может быть и, вообще говоря, является очень сложной. Мы будем оперировать с одной переменной Q , но это не ограничивает общности рассуждений.

Однако если нам не нужно измерять $Q(t)$, а достаточно исследовать лишь зависимость от $q(t)$, то ответ запишется в форме

$$J = \iint \exp(i\{S[q(t)] - S[q'(t)]\}) F[q(t), q'(t)] \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}q'(t), \quad (12.89)$$

где функционал $F[q(t), q'(t)]$ мы назовем *функционалом влияния*. Этот функционал зависит от двух функций $q(t)$ и $q'(t)$ и для рассматриваемой частной задачи выражается в виде

$$F[q(t), q'(t)] = \sum_f \iint \exp(i\{S_0[Q(t)] - S_0[Q'(t)] + S_{\text{взаим}}[q(t), Q(t)] - S_{\text{взаим}}[q'(t), Q'(t)]\}) \mathcal{D}Q(t) \mathcal{D}Q'(t). \quad (12.90)$$

Сумма по f означает, что мы должны взять сумму по всем возможным конечным состояниям Q . Это связано с тем, что не проводится никаких измерений координат Q и возможны все конечные состояния среды. Поэтому нужно сложить вероятности всех возможных процессов [т. е. все функции (12.88)]. Например, в координатном представлении $\sum_f$ как раз подразумевает, что, начиная с некоторого момента времени t_f , взаимодействие для нас больше не представляет интереса; мы должны взять $Q(t_f) = Q'(t_f) = Q_f$ и проинтегрировать по всем Q_f .

Резюмируя, скажем, что поведение системы в любой среде можно описать с помощью двойных интегралов по траекториям, аналогичных интегралу (12.89), где функционал F отражает свойства среды — ее влияние на систему — и учитывает все связанные с этим изменения $q(t)$. Две различные окружающие среды A и B , совершенно различные по своему физическому строению, тем не менее могут оказаться неразличимы по поведению системы q , если с ними связан один и тот же функционал влияния F . Функционал F — это нечто аналогичное внешним «силам», которые вводятся при классическом рассмотрении поведения одной из взаимодействующих систем. Мы можем изучать лишь движение системы q , при условии что знаем зависимость от времени сил, действующих на нее со стороны среды. Ньютоновские уравнения движения для q представляют собой грубую аналогию выражения (12.89), тогда как выражение (12.90) соответствует учету сил, обусловленных средой. Две различные среды эквивалентны, если они одинаково действуют на q . Естественно, это — очень грубая аналогия. Что касается функционала F , то он описывает полное влияние среды, включая изменения в поведении самой среды из-за реакции со стороны q . Это аналогично тому, как если бы при классическом рассмотрении нам были бы известны не только сами силы, но и их изменение во времени при любом возможном движении иссле-

дуемой системы $q(t)$. Силы воздействия среды, вообще говоря, зависят от движения $q(t)$, так как сама среда подвергается влиянию со стороны интересующей нас системы q .

Таким образом, мы приходим к необходимости изучить свойства функционалов влияния. Составим список нескольких правил, определяющих такие свойства, и сформулируем некоторые допущения, при которых они получаются.

Правило I.

$$F[q(t), q'(t)]^* = F[q'(t), q(t)], \quad (12.91)$$

где значком $*$ отмечено комплексное сопряжение.

Правило II. Если функции $q(t)$ и $q'(t)$ выбраны равными для всех t , больших любого a , то F не зависит от фактических значений $q(t)$ для $t > a$.

Правило III. Если F_i — функционал влияния для определенной среды i и мы фактически не знаем реального окружения системы, а знаем лишь, что вероятность найти систему в среде i равна ω_i , то эффективный функционал влияния (для расчета всех вероятностей)

$$F = \sum_i \omega_i F_i. \quad (12.92)$$

Правило IV. Если система q одновременно взаимодействует с двумя внешними системами A и B и если системы A и B непосредственно не взаимодействуют между собой, а их начальные состояния никак не связаны, то

$$F = F_A \cdot F_B, \quad (12.93)$$

где F_A — функционал влияния для случая, когда с q взаимодействовала бы только одна система A , и F_B — такой же функционал для системы B .

Правило V. Если функционал F можно с достаточной точностью аппроксимировать выражением

$$F = \exp \left\{ i \int [q(t) - q'(t)] V(t) dt \right\}, \quad (12.94)$$

то система ведет себя так же, как под влиянием классического потенциала $V(t)$, который вносит в действие вклад $\int q(t) V(t) dt$. Если же функционал имеет вид $F(q, q') = \Phi[q(t) - q'(t)]$, где $\Phi[k(t)]$ — функционал произвольной формы, то окружение эквивалентно классическому случаю, однако с неопределенным потенциалом $V(t)$ [в этом случае Φ — характеристический функционал для распределения $V(t)$].

Справедливость правила I очевидна непосредственно из выражения (12.90). Это же выражение объясняет также правило II,

однако гораздо менее наглядным образом. Отметим, что для произвольной системы с некоторым определенным действием $S_a(Q)$ при любом заданном начальном состоянии

$$\sum_f \int \int \exp(i \{S_a[Q(t)] - S_a[Q'(t)]\}) \mathcal{D}Q(t) \mathcal{D}Q'(t) = 1. \quad (12.95)$$

Это следует из того, что интегралы и сумма по конечным состояниям $\sum_f$ эквивалентны соотношению

$$\int K(Q_f, t_f; Q_i, t_i) K^*(Q_f, t_f; Q'_i, t_i) \mathcal{D}Q_f = \delta(Q_i - Q'_i) \quad (12.96)$$

[см. формулу (4.37)]. Таким образом, если бы начальная волновая функция была $\varphi(Q_i)$, то, умножая, как это делалось в выражении (12.79), на $\varphi(Q_i)$ $\varphi^*(Q_i)$ и интегрируя, мы получили бы

$$\int \varphi(Q_i) \varphi^*(Q'_i) \delta(Q_i - Q'_i) dQ_i dQ'_i = \int |\varphi(Q)|^2 dQ = 1. \quad (12.97)$$

Заметим теперь, что если в выражении (12.90) мы положим $q'(t) = q(t)$ для любого заданного $q(t)$ и всех значений t , то получим выражение, в точности совпадающее с равенством (12.95), где полное суммарное действие равно

$$S_a[Q(t)] = S_0[Q(t)] + S_1[q(t), Q(t)],$$

причем

$$S_a[Q'(t)] = S_0[Q'(t)] + S_1[q(t), Q'(t)],$$

что и требуется, пока $q'(t) = q(t)$. Следовательно,

$$F[q(t), q(t)] = 1.$$

Те же рассуждения, если их провести применительно к интервалу времени $a \leq t \leq t_f$ и использовать соотношение, сходное с (12.96), но где t_i , Q_i заменены соответственно на a и Q_a , показывают, что если $q(t) = q'(t)$ для $t > a$, то зависимость F от $q(t)$ при $t > a$ исчезает, так как правая сторона (12.96) при $t > a$ не зависит от $q(t)$.

Правило III с очевидностью следует из того, что вероятности определяются суммированием всех возможных значений J .

Правило IV вытекает из выражения (12.90), если в соответствии с условием действие в выражении (12.90) имеет вид

$$S_{0A}[Q_A(t)] + S_{1A}[q(t), Q_A(t)] + S_{0B}[Q_B(t)] + S_{1B}[q(t), Q_B(t)].$$

При этом экспоненциальная функция суммы превращается в произведение, дающее интегралы F , если начальное состояние само представляется произведением волновых функций.

Правило V — это просто формулировка наших результатов, приведенных в соотношениях (12.82) и (12.85).

Мы рассмотрели некоторые общие свойства функционалов влияния. Связанные с ними расчеты используют различные методы вычисления интегралов по траекториям (12.89). Закончим этот параграф рассмотрением некоторых важных функционалов влияния.

Подобно тому, насколько простыми и важными оказываются гауссово распределение вероятности и гауссово распределение шума, настолько важны и функционалы влияния, содержащие координаты $q(t)$, $q'(t)$ в виде квадратичных форм в экспонентах; назовем их гауссовыми функционалами влияния.

Во-первых, если среда представляет собой систему гармонических осцилляторов в основном состоянии (или при заданной температуре), линейно связанных с рассматриваемой системой q , то вычисление выражения (12.90) показывает, что F — гауссов функционал. Однако гауссовы функционалы влияния (подобно гауссовым вероятностям), дают хорошее приближение для гораздо более широкого класса задач, в которых эффект является суммарным результатом большого числа малых воздействий. Рассмотрим, например, атом, слабо взаимодействующий с большим числом атомов окружающего газа. Влияние каждого атома A очень мало, так что его функционал влияния F_A немногим отличается от единицы. Однако, согласно правилу IV, полный функционал F является произведением многих таких множителей и его можно аппроксимировать экспоненциальной функцией суммы всех малых вкладов. Разложение этого вклада с точностью до величины первого и второго порядков малости относительно взаимодействия с отдельным атомом приводит к функционалу влияния гауссова типа.

Как иллюстрацию этого заключения, рассмотрим влияние металлического образца, находящегося в объемном резонаторе. Это влияние можно просто, в линейной форме, выразить одной функцией импеданса, несмотря на всю сложность поведения электронов в металле. Функционал влияния металла Q на объемный резонатор q близок к гауссову, и в этом смысле металл эквивалентен некоторой системе гармонических осцилляторов, которая приводила бы к тому же самому функционалу влияния.

Наиболее общий экспоненциальный функционал с линейной зависимостью от координат $q(t)$ и $q'(t)$ имеет вид

$$F[q(t), q'(t)] = \exp \left[i \int q(t) V(t) dt - i \int q'(t) U(t) dt \right], \quad (12.98)$$

где $V(t)$ и $U(t)$ — произвольные комплексные функции. Однако, чтобы оказаться функционалом влияния, он должен удовлетворять пяти перечисленным правилам. Правило I требует, чтобы $U(t) = V^*(t)$, а из правила II следует $U(t) = V(t)$, поэтому U

и V должны быть равными и действительными величинами. Таким образом, согласно правилу V, самый общий линейный функционал эквивалентен действию классического внешнего потенциала.

Нет необходимости обсуждать этот простой случай далее; он анализируется до конца, если добавить член $q(t) V(t)$ к гамильтониану невозмущенной системы. Если в показателе экспоненты содержатся и квадратичный и линейный члены, то последний можно выделить в отдельный множитель, так что правило IV позволяет нам утверждать: в данном случае действует классический потенциал плюс эффект чисто квадратичного функционала.

Самый общий экспоненциальный функционал, квадратичный относительно своих аргументов, имеет вид

$$F[q(t), q'(t)] = \exp \left\{ - \int \int [\alpha(t, t') q(t) q(t') + \beta(t, t') q'(t) q'(t') + \gamma(t, t') q(t) q'(t') + \delta(t, t') q'(t) q(t')] dt dt' \right\} \quad (12.99)$$

с произвольными комплексными функциями α , β , γ и δ . (Эти функции достаточно определить только для $t > t'$.) Интегралы берутся здесь по всему интересующему нас интервалу времени, однако мы всегда выбираем $t > t'$; это не ограничивает общности и удобно для дальнейшего анализа. Чтобы функционал оказался функционалом влияния, мы должны в соответствии с правилом I положить

$$\beta(t, t') = \alpha^*(t, t') \quad (12.100)$$

и

$$\gamma(t, t') = \delta^*(t, t'). \quad (12.101)$$

Правило II дает нам больше информации. Если положить $q(t) = q'(t)$ для $t > a$ и $t' < a$, то выражение

$$\int_a^a \int [\alpha(t, t') q(t) q(t') + \beta(t, t') q(t) q'(t') + \gamma(t, t') q(t) q'(t') + \delta(t, t') q(t) q(t')] dt dt', \quad (12.102)$$

составляющее часть равенства (12.99), не должно зависеть от $q(t)$ при произвольных значениях $q(t')$ в области $t > a$ и $q'(t')$ в области $t' < a$. Для этого необходимо, чтобы

$$\begin{aligned} \delta(t, t') &= -\alpha(t, t'), \\ \gamma(t, t') &= -\beta(t, t') \end{aligned} \quad (12.103)$$

до тех пор, пока $t > a$ и $t' < a$. А так как a — произвольная величина, то условия (12.103) должны выполняться для всех t и t' , если только $t > t'$.

Отсюда следует, что самый общий гауссов функционал влияния зависит только от одной комплексной функции $\alpha(t, t')$ и выражается в форме

$$\exp \left\{ - \int \int^t [q(t) - q'(t)] [q(t') \alpha(t, t') - q'(t') \alpha^*(t, t')] dt dt' \right\}. \quad (12.104)$$

В случае когда $\alpha(t, t')$ — действительная функция, например, равна $A(t, t')$, наш функционал эквивалентен экспоненциальному фактору в выражении (12.87), и мы получаем эквивалент классического шумового возмущения. Вообще говоря, в квантовомеханических системах α — комплексная величина. Важным частным случаем является функция α , зависящая только от разности t и t' : $\alpha(t, t') = \alpha(t - t')$. В этом случае мы имеем дело с окружающей системой, усредненные свойства которой не зависят от абсолютного времени.

Чтобы облегчить понимание некоторых свойств выражения (12.104), найдем вероятность того, что система q переходит из энергетического состояния n в некоторое другое ортогональное состояние m за время T . Предположим, что α очень мало и можно использовать теорию возмущений. Если разложить F , определяемый выражением (12.104), то главный член обратится в нуль из-за ортогональности состояний. Следующий член, линейный

по α , состоит из четырех частей. Одна из них это $\int \int^t \alpha(t, t') \times \times q(t) q(t') dt' dt$. Если подставить ее вместо F в выражение (12.89) и вычислить, как в (12.83) при $\varphi = \varphi_n$ и $\chi = \varphi_m$, то видно, что интеграл по $\mathcal{D}q(t)$ и $\mathcal{D}q'(t)$ разбивается на произведение двух сомножителей. Первый интеграл по q имеет вид

$$\int e^{iS[q]} \left[- \int \int^t \alpha(t, t') q(t) q(t') dt' dt \right] \mathcal{D}q(t)$$

и представляет собой матричный элемент

$$\begin{aligned} {}_m \left\langle - \int \int^t \alpha(t, t') q(t) q(t') dt' dt \right\rangle_n = \\ = - \int \int^t {}_m \langle q(t) q(t') \rangle_n \alpha(t, t') dt' dt \end{aligned} \quad (12.105)$$

(см. гл. 4). Интеграл по $\mathcal{D}q'$ равен просто $\int e^{iS[q']} \mathcal{D}q'$ и комплексно сопряжен матричному элементу ${}_m \langle 1 \rangle_n$. Рассматривая аналогичным способом другие члены, получаем полную вероятность

перехода

$$P(n \rightarrow m) = \int \int_0^t [-\alpha(t, t')_m \langle q(t) q(t') \rangle_n m \langle 1 \rangle_n - \\ - \alpha^*(t, t')_m \langle 1 \rangle_n m \langle q(t) q(t') \rangle_n^* + \alpha^*(t, t')_m \langle q(t) \rangle_n m \langle q(t') \rangle_n^* + \\ + \alpha(t, t')_m \langle q(t) \rangle_n^* m \langle q(t') \rangle_n] dt' dt. \quad (12.106)$$

Если состояния m и n ортогональны, то $m \langle 1 \rangle_n = 0$; если же действие $S[q]$ соответствует постоянному гамильтониану с энергетическими уровнями E_k , то

$$m \langle q(t) \rangle_n = q_{mn} e^{-i(E_m - E_n)t}. \quad (12.107)$$

В выражении (12.106) остаются только два последних члена, комплексно сопряженных друг с другом, так что

$$P(n \rightarrow m) = 2 \operatorname{Re} \int \int_0^t \alpha(t, t') e^{-i(E_m - E_n)(t - t')} dt' dt. \quad (12.108)$$

Задача 12.3. Проверьте, что для $m = n$ в соответствии с законом сохранения вероятности $P(m \rightarrow m) = 1 - \sum_n P(m \rightarrow n)$.

Для однородной по времени среды $\alpha(t, t') = \alpha(t - t')$. Предположим, что мы определили преобразование Фурье

$$a(\nu) = \int_0^\infty \alpha(\tau) e^{-\nu\tau} d\tau \quad (12.109)$$

$[\alpha(t)$ не определена для $t < 0$]. Так как вероятность, задаваемая формулой (12.108), пропорциональна интервалу времени, на который распространяются интегралы, то можно определить скорость перехода за 1 сек и вероятность перехода

$$P(n \rightarrow m)_{\text{за 1 сек}} = 2a_R(E_m - E_n) |q_{nm}|^2, \quad (12.110)$$

где мы выделили действительную и мнимую части $a(\nu)$:

$$a(\nu) = a_R(\nu) + ia_I(\nu). \quad (12.111)$$

Можно отметить также, что для возмущения, вызываемого классическим потенциалом, соответствующим гауссову шуму, $\alpha(\tau)$ — действительная функция [см. (12.87)], а действительная часть $a(\nu)$ является спектральной функцией мощности шума, определенной соотношением (12.32). Следовательно, для таких классических шумовых систем

$$a_R(\nu) = a_R(-\nu) \quad (12.112)$$

и в первом порядке по возмущению

$$[\text{скорость перехода } n \rightarrow m] = [\text{скорость перехода } m \rightarrow n]. \quad (12.113)$$

Обе скорости пропорциональны мощности $P(\omega)$ при значении ω , равном частоте перехода. Таким образом, классические потенциалы с равной вероятностью вызывают переходы вверх и вниз.

Другой интересный пример представляет среда, которая не может с какой-либо заметной вероятностью возмещать энергию. Например, если первоначально она находится в основном состоянии или при нулевой температуре. Мы назовем такую среду «холодной». В этом случае переходы системы q с возрастанием энергии ($E_m > E_n$) маловероятны. Следовательно, для систем в холодной среде

$$a_R(v) = 0 \quad \text{при} \quad v > 0 \quad (12.114)$$

и в первом порядке по возмущению

$$[\text{скорость перехода } n \rightarrow m] = 0, \quad \text{если} \quad E_m > E_n. \quad (12.115)$$

Так как любая функция $a(v)$ может быть представлена суммой двух величин [величины, определяемой соотношением (12.112), и величины, определенной в (12.114)], то очевидно, что любой не зависящий от времени гауссов функционал эквивалентен системе в холодной среде, подвергавшейся воздействию флуктуирующего классического потенциала, описываемого гауссовым выражением. Этот вывод следует из правила IV и того факта, что произведение двух гауссовых функций тоже есть гауссова функция. Если воздействие одной среды на систему представляется функцией $A_1(t, t')$, как это сделано в соотношении (12.87), а воздействие другой среды — аналогичной функцией $A_2(t, t')$, то единственный член взаимодействия в парциальном результирующем гауссовом функционале равен $A_1 + A_2$.

§ 9. Функционал влияния гармонического осциллятора

Ниже мы дадим пример того, как из выражения (12.90) можно вывести функционал F для среды, состоящей из гармонических осцилляторов с координатами Q . Осцилляторы находятся в основном состоянии и их координаты линейно связаны с координатами q , взаимодействие описывается членом $S_i(q, Q) = C \int q(t) Q(t) dt$. Будем считать, что все осцилляторы имеют единичную массу и собственную частоту ω , так что

$$S_0(Q) = \frac{1}{2} \int [\dot{Q}(t)^2 + \omega^2 Q(t)^2] dt. \quad (12.116)$$

Тогда

$$F[q(t), q'(t)] = \sum_m \iint \exp \left\{ i \left[\frac{1}{2} \dot{Q}(t)^2 + \frac{1}{2} \omega^2 Q(t)^2 + \right. \right.$$

$$+ Cq(t)Q(t)]dt\} \exp \left\{ -i \int \left[\frac{1}{2} \dot{Q}'(t)^2 + \frac{1}{2} \omega^2 Q'(t)^2 + Cq'(t)Q'(t) \right] dt \right\} \mathcal{D}Q \mathcal{D}Q'(t), \quad (12.117)$$

где m — конечное состояние, а первоначальным является основное состояние. Легко видеть, что интеграл по Q гауссов, и фактически мы уже вычисляли его. Он точно совпадает с амплитудой перехода G_{m0} , полученной в § 9 гл. 8 для гармонического осциллятора, на который действует внешняя сила. Сила, обозначенная там через $\gamma(t)$, здесь равна $Cq(t)$ ¹). Поэтому амплитуда определяется выражением (8.145) при $n = 0$:

$$G_{m0} = (m!)^{-1/2} (i\beta^*)^m G_{00}, \quad (12.118)$$

причем G_{00} определяется равенством (8.138), а β^* — равенством (8.143) с заменой $\gamma(t)$ на $Cq(t)$. Аналогично интеграл по Q' является комплексно-сопряженной величиной для такого же выражения, где $\gamma(t)$ следует лишь заменить на $Cq'(t)$. Величины, полученные после такой замены, будем отмечать штрихами. Тогда сумма по конечным состояниям в выражении (12.117) даст нам

$$E(q, q') = \sum_m G_{m0} G_{m0}^* = \sum_n (m!)^{-1/2} (i\beta^*)^m G_{00} (m!)^{-1/2} (-i\beta')^m G_{00}' = G_{00} G_{00}' e^{\beta^* \beta'}. \quad (12.119)$$

Как и ожидалось, подстановка равенств (8.138) и (8.143) приводит к функционалу F типа (12.104), но при этом

$$\alpha(t, t') = \frac{C^2}{2\omega} e^{-i\omega(t-t')}. \quad (12.120)$$

¹) Возможно, для читателя будет предпочтительнее представить выражение (12.117) в форме

$$F[q(t), q'(t)] = \int dQ_f K(Q_f, t_f; Q_i, t_i) K'^*(Q_f, t_f; Q'_i, t_i) \varphi_0(Q_i) \varphi_0^*(Q'_i) dQ_i dQ'_i,$$

где K — ядро вида (3.66) для осциллятора, движущегося под действием внешней силы $f(t) = Cq(t)$, а K' — аналогичное ядро для $f(t) = Cq'(t)$; $\varphi_0(Q)$ — волновая функция осциллятора в основном состоянии. Тогда все переменные Q_i , Q'_i и Q_f входят в простой гауссовой форме и интегрирование можно выполнить непосредственно. Очень просто рассмотреть случай конечной температуры. При этом вероятность обнаружить систему в начальном состоянии n пропорциональна $e^{-\beta E_n}$, так что, согласно правилу IV, окончательное выражение функционала F найдем, если в полученном выше выражении волновые функции $\varphi_0(Q_i) \varphi_0^*(Q'_i)$ заменить на

$$\text{const} \sum_n \varphi_n(Q_i) \varphi_n^*(Q'_i) e^{-\beta E_n},$$

т. е. на матрицу плотности $\rho(Q_i, Q'_i)$, выведенную в § 1 гл. 10. Интегралы по-прежнему остаются гауссовыми.

Например, члены с qq' в выражении (12.104) получаются прямо из члена $\beta^*\beta'$ в экспоненте; соотношение (8.143) для этого случая дает

$$\frac{C^2}{2\omega} \left[\int q(t) e^{i\omega t} dt \right] \left[\int q'(t) e^{-i\omega t} dt \right] =$$

$$= \frac{C^2}{2\omega} \int \int [q(t) q'(t') e^{i\omega(t-t')} + q'(t) q(t') e^{-i\omega(t-t')}] dt' dt. \quad (12.121)$$

Поэтому определяемая преобразованием (12.109) величина $a(v)$ равна

$$a(v) = \frac{C^2}{2\omega} \int_0^\infty e^{-i\omega t} e^{-ivt} dt = \frac{C^2}{2\omega} \left[-iPP \frac{1}{\omega + v} + \pi \delta(\omega + v) \right] \quad (12.122)$$

[см. равенство (5.17) и приложение], так что действительная часть

$$a_R(v) = \frac{\pi C^2}{2\omega} \delta(\omega + v). \quad (12.123)$$

Для положительных v эта величина обращается в нуль. Как и ожидалось, мы получили «холодную среду», определяемую выражением (12.114).

Если действует много независимых осцилляторов с различными частотами, то, согласно правилу IV, их функции $a_R(v)$ складываются. Поэтому в таком гауссовом приближении любая холодная система эквивалентна континууму осцилляторов, находящихся в основном состоянии. Это — следствие того, что для отрицательных v любую функцию $a_R(v)$ можно построить из δ -функций в форме (12.123).

Другой интересный пример — это взаимодействие с осциллятором при конечной температуре. Если температура равна T , то начальное состояние — это состояние n с относительной вероятностью $e^{-E_n/kT}$. В нашем случае абсолютная вероятность

$$w_n = e^{-n\hbar\omega/kT} (1 - e^{-\hbar\omega/kT}). \quad (12.124)$$

Если бы начальным было состояние n , то функционал влияния имел бы вид

$$F_n = \sum_m G_{mn} G_{mn}^*, \quad (12.125)$$

а не (12.119). Используя правило III, сложим эти функционалы с весами w_n , так что окончательное выражение для функционала F равно

$$F = \sum_{m,n} G_{mn} G_{mn}^* e^{-n\hbar\omega/kT} (1 - e^{-\hbar\omega/kT}). \quad (12.126)$$

Эту сумму трудно получить непосредственно из выражения (8.145).

Она равна

$$F = G_{00} G'_{00} e^{\beta^* \beta'} \exp \left[- \frac{(\beta - \beta') (\beta^* - \beta'^*)}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \right]. \quad (12.127)$$

Вместо (12.123) для $a_R(\nu)$ получается выражение

$$a_R(\nu) = \frac{\pi C^2}{2\omega} \left[\frac{e^{\hbar \omega / kT}}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \delta(\omega + \nu) + \frac{1}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \delta(\omega - \nu) \right], \quad (12.128)$$

а суммы таких выражений для многих осцилляторов дают описание среды. Здесь возможны переходы как к меньшим ($\omega < 0$), так и к большим энергиям.

Заметим, что если $\nu > 0$, то обратится в нуль первая δ -функция, тогда как при $\nu < 0$ равна нулю вторая δ -функция; кроме того, как и следовало ожидать,

$$a_R(-|\nu|) = e^{\hbar |\nu| / kT} a_R(|\nu|). \quad (12.129)$$

Это соотношение означает, что в теории возмущений, когда $E_n > E_m$,

$$\frac{\text{вероятность перехода за 1 сек к большим энергиям } (m \rightarrow n)}{\text{вероятность перехода за 1 сек к меньшим энергиям } (n \rightarrow m)} = e^{-(E_n - E_m) / kT}, \quad (12.130)$$

при этом мы воспользовались выражением (12.110).

Таким образом, если система q занимает различные состояния n с относительными вероятностями $e^{-E_n / kT}$, то средние числа переходов к большим и меньшим энергиям будут выравниваться и в случае слабого взаимодействия с окружающей средой система будет находиться в статистическом равновесии. Именно это и следовало ожидать из принципов статистики. Любая среда с температурой T , приводящая к квадратичному функционалу влияния, будет обладать свойствами, описываемыми соотношением (12.129).

Для атома, рассматриваемого в качестве системы q и взаимодействующего с электромагнитным полем при температуре T как с некоторой средой, величина $a_R(\nu)$ дается выражением (12.128), проинтегрированным по всем собственным колебаниям поля с различными частотами ω . Его можно разделить на часть, соответствующую холодной среде, описываемую уравнением (12.123), и внешний шумовой потенциал

$$a_R(\nu) = \frac{\pi C^2}{2\omega} \delta(\omega + \nu) + \frac{1}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \frac{\pi C^2}{2\omega} [\delta(\omega + \nu) + \delta(\omega - \nu)]. \quad (12.131)$$

Первый член вызывает переходы только к более низким уровням, называемым спонтанным излучением. Второй член с одинаковой легкостью вызывает переходы вверх и вниз, называемые индуцированным излучением, или индуцированным поглощением. Мы

говорим, что этот переход вызывается внешним потенциалом или шумом, среднеквадратичная интенсивность которого при частоте ν меняется с температурой как $1/(e^{h\nu/kT} - 1)$. Таким способом Эйнштейн впервые рассмотрел законы излучения черного тела. Как мы теперь видим, любое окружение, дающее квадратичный потенциал влияния при температуре T (назовем его окружением с линейной реакцией), можно рассмотреть тем же путем. Многие исследователи распространили аргументы Эйнштейна на другие системы, например на шумовые флуктуации потенциала в вольтметре при температуре T . Первый член измеряет скорость, с которой энергия определенным способом отбирается от системы. Он измеряет величину диссипации, вызванной средой (например, электрическим сопротивлением металла или радиационным сопротивлением электромагнитного поля). Относительно тел при температуре T можно сказать, что они ведут себя так, как будто, кроме диссипации, имеется генерируемый средой шумовой сигнал, средний квадрат которого при любой частоте пропорционален диссипации при той же частоте и величине $(e^{h\nu/kT} - 1)^{-1}$. Это утверждение называется *диссипативно-флуктуационной теоремой*.

Этот вопрос мы рассматривать здесь не будем (см. [20—22]).

§ 10. Заключение

Из рассмотренных приложений интегралов по траекториям к теории вероятностей ясно, что если подынтегральные выражения имеют гауссову форму, то наш метод может оказаться весьма полезным. Однако при этом мы не выходим за круг задач, которые можно решить и другими методами без использования интегралов по траекториям. Возникает резонный вопрос о практической значимости интегралов по траекториям. На это можно сказать лишь, что если задача не является гауссовой, то с помощью интегралов по траекториям ее по крайней мере можно сформулировать, исследовать и надеяться, что дальнейшее развитие этого метода позволит также и решить задачу. Единственный случай, когда с помощью интегралов по траекториям получается результат, который нельзя просто вывести обычными методами, — это вариационный принцип, обсуждавшийся в гл. 11. Можно думать, что при дальнейшем совершенствовании метода число таких результатов возрастет.

Стоит также подчеркнуть, что этот метод допускает быстрый переход от одной формулировки задачи к другой и часто дает ясное или легко выводимое указание на соотношение, которое затем со значительно большей затратой труда можно вывести обычными способами.

Что касается применений к квантовой механике, то методу интегралов по траекториям присущи, к сожалению, серьезные недостатки. Таким методом нельзя просто рассматривать спиновые или другие подобные операторы. Наиболее плодотворным он оказывается в применении к системам, для описания которых вполне достаточно координат и канонически сопряженных им импульсов. Тем не менее спин является неотъемлемой частью реальных квантовомеханических систем. И очень серьезным ограничением является то, что полуцелый спин электрона не имеет простого и ясного представления в нашем методе. Спин электрона можно ввести, если амплитуды вероятности и все величины рассматривать как кватернионы, а не как обычные комплексные числа; однако возникающая при этом некоммутативность таких чисел — серьезное осложнение.

Вместе с тем многие результаты и формулировки метода интегралов по траекториям можно выразить с помощью другого математического формализма, представляющего собой одну из форм исчисления упорядоченных операторов (см. [23]). В этой форме большинство результатов предыдущих глав находят аналогичное, но более общее представление, включающее некоммутирующие переменные (такое обобщение неизвестно лишь для специальных задач гл. 11). Например, обсуждение в данной главе функционалов влияния должно натолкнуть читателя на мысль, что важным и интересным обобщением была бы связь среды не с координатой q , а с некоммутирующим оператором, таким, как спин. Такие обобщения не могут быть просто выражены с помощью интегралов по траекториям, но легко формулируются на языке тесно связанного с ним операторного исчисления.

Стоит и дальше прилагать усилия, чтобы распространить метод интегралов по траекториям за его сегодняшние пределы. Несмотря на ограничения, ценность его весьма велика благодаря той помощи, которую он оказывает интуиции исследователя в соединении физического понимания сути дела с математическим анализом.

ЧАСТО ПРИМЕНЯЕМЫЕ ИНТЕГРАЛЫ

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}} e^{-b^2/4a},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2} e^{b(x_2-x)^2} dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp \left[\frac{ab}{a+b} (x_1-x_2)^2 \right],$$

$$\int_0^{\infty} \exp \left(-\frac{a}{x^2} - bx^2 \right) dx = \sqrt{\frac{\pi}{4b}} \exp(-2\sqrt{ab}),$$

$$\int_0^T \exp \left(-\frac{a}{T-\tau} - \frac{b}{\tau} \right) \frac{d\tau}{\sqrt{(T-\tau)\tau^3}} = \exp \frac{[-(1/T)(\sqrt{a} + \sqrt{b})^2]}{\sqrt{bT/\pi}},$$

$$\begin{aligned} & \int_0^T \exp \left(-\frac{a}{T-\tau} - \frac{b}{\tau} \right) \frac{d\tau}{[\sqrt{(T-\tau)\tau}]^3} = \\ & = \sqrt{\frac{\pi}{T^3}} \frac{\sqrt{a} + \sqrt{b}}{\sqrt{ab}} \exp \left[-\frac{1}{T} (\sqrt{a} + \sqrt{b})^2 \right], \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

$$\int_0^{\pi/2} e^{-q \sin x} \sin 2x dx = \frac{2}{q^2} [(q-1)e^q + 1],$$

$$\left. \begin{aligned} & \int_0^{\pi} e^{p \cos x} \sin(p \sin x) \sin ax dx \\ & \int_0^{\pi} e^{p \cos x} \cos(p \sin x) \cos ax dx \end{aligned} \right\} = \frac{\pi p^a}{2a!},$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\lambda x^m} x^k dx = \frac{1}{m} \lambda^{-(k+1)/m} \Gamma \left(\frac{k+1}{n} \right).$$

1. Фейнман Р. Р., Rev. Mod. Phys., 20, 367 (1948) (см. перевод в сб. «Новейшее развитие квантовой электродинамики, ИЛ, 1954).
2. Schiff L. I., Quantum Mechanics, New York, 1955 (см. перевод: Шифф Л., Квантовая механика, ИЛ, 1957).
3. Jahnke E., Emde F., Tables of Functions, New York, 1943 (см. перевод: Янке Е., Эмде Ф., Таблицы функций, М.—Л., 1948).
4. Фейнман Р. Р., Rev. Mod. Phys., 20, 2, 371 (1948) (см. перевод в сб. «Новейшее развитие квантовой электродинамики, ИЛ, 1954).
5. Plesset M. S., Amer. Journ. Phys., 9, 1, 1—10 (1941).
6. Wheeler J. A., Feynman R. P., Rev. Mod. Phys., 17, 157 (1945).
7. Feynman R. P., Phys. Rev., 80, 440 (1950).
8. Feynman R. P., Phys. Rev., 97, 660 (1955).
9. Frohlich H., Advans. Phys., 3, 325 (1954).
10. Lee T., Pines D., Phys. Rev., 92, 883 (1953).
11. Haga E., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 11, 449 (1954).
12. Пекар С. И., ЖЭТФ, 19, 796 (1949).
13. Schultz T. D., Phys. Rev., 116, 526 (1959).
14. Lee T., Low W., Pines D., Phys. Rev., 90, 297 (1953).
15. Gross E. P., Phys. Rev., 100, 1571 (1955).
16. Пекар С. И., Исследования по электронной теории кристаллов, М., 1951.
17. Боголюбов Н. Н., Укр. мат. журн., 2, 3 (1950).
18. Тябликов С. В., ЖЭТФ, 21, 377 (1951).
19. Cramer H., Mathematical Methods of Statistics, Princeton, 1951 (см. перевод 1-го изд.: Крамер Г., Математические методы статистики, М., 1948).
20. Feynman R. P., Vernon F. L., Ann. of Phys., 24, 118 (1963).
21. Wells W. H., Ann. of Phys., 12, 1 (1961).
22. Feynman R. P., Hellwarth R. W., Iddings C. K., Platzman P. M., Phys. Rev., 127, 1004 (1962).
23. Feynman R. P., Phys. Rev., 84, 108 (1951).
24. Dirac P. A. M., Principles of Quantum Mechanics, Oxford, 1947 (см. перевод: Дирак П. А. М., Принципы квантовой механики, М., 1960).
25. Everling et al., Nucl. Phys., 15, 342 (1960).
26. Feynman R. P. The Concept of Probability in Quantum Mechanics, Berkeley, 1951.

О Г Л А В Л Е Н И Е

<i>Предисловие редактора перевода</i>	5
<i>Предисловие</i>	11
Г л а в а 1. Основные идеи квантовой механики	13
§ 1. Вероятность в квантовой механике	13
§ 2. Принцип неопределенности	21
§ 3. Интерферирующие альтернативы	25
§ 4. Краткий обзор понятий, связанных с вероятностью	31
§ 5. Над чем еще следует подумать	34
§ 6. Цель этой книги	36
Г л а в а 2. Квантовомеханический закон движения	38
§ 1. Действие в классической механике	38
§ 2. Квантовомеханическая амплитуда вероятности	41
§ 3. Классический предел	42
§ 4. Сумма по траекториям	44
§ 5. Последовательные события	49
§ 6. Некоторые замечания	52
Г л а в а 3. Дальнейшее развитие идей на конкретных примерах	54
§ 1. Свободная частица	54
§ 2. Дифракция при прохождении через щель	58
§ 3. Результаты в случае щели с резкими краями	68
§ 4. Волновая функция	70
§ 5. Интегралы Гаусса	71
§ 6. Движение в потенциальном поле	76
§ 7. Системы с многими переменными	79
§ 8. Системы с разделяющимися переменными	80
§ 9. Интеграл по траекториям как функционал	82
§ 10. Взаимодействие частицы с гармоническим осциллятором	84
§ 11. Вычисление интегралов по траекториям с помощью рядов Фурье	86
Г л а в а 4. Шредингеровское описание квантовой механики	89
§ 1. Уравнение Шредингера	90
§ 2. Гамильтониан, не зависящий от времени	98
§ 3. Нормировка волновых функций свободной частицы	103

Глава 5. Измерения и операторы	111
§ 1. Импульсное представление	111
§ 2. Измерение квантовомеханических величин	122
§ 3. Операторы	129
Глава 6. Метод теории возмущений в квантовой механике	135
§ 1. Ряд теории возмущений	135
§ 2. Интегральное уравнение для ядра Kv	142
§ 3. Разложение волновой функции	144
§ 4. Рассеяние электрона на атоме	145
§ 5. Возмущения, зависящие от времени, и амплитуды переходов	160
Глава 7. Матричные элементы перехода	181
§ 1. Определение матричных элементов перехода	181
§ 2. Функциональные производные	188
§ 3. Матричные элементы перехода для некоторых специальных функционалов	192
§ 4. Общие соотношения для квадратичной функции действия	200
§ 5. Матричные элементы перехода и операторные обозначения	203
§ 6. Разложение по возмущениям для векторного потенциала	208
§ 7. Гамильтониан	211
Глава 8. Гармонические осцилляторы	216
§ 1. Простой гармонический осциллятор	217
§ 2. Многоатомная молекула	221
§ 3. Нормальные координаты	227
§ 4. Одномерный кристалл	231
§ 5. Приближение непрерывной среды	237
§ 6. Квантовомеханическое рассмотрение цепочки атомов	241
§ 7. Трехмерный кристалл	243
§ 8. Квантовая теория поля	249
§ 9. Гармонический осциллятор, на который действует внешняя сила	252
Глава 9. Квантовая электродинамика	256
§ 1. Классическая электродинамика	257
§ 2. Квантовая механика поля излучения	263
§ 3. Основное состояние	265
§ 4. Взаимодействие поля с веществом	268
§ 5. Электрон в поле излучения	275
§ 6. Лэмбовский сдвиг	278
§ 7. Излучение света	283
§ 8. Краткие выводы	285

Глава 10. Статистическая механика	289
§ 1. Функция распределения	290
§ 2. Вычисление с помощью интеграла по траекториям	294
§ 3. Квантовомеханические эффекты	300
§ 4. Системы с несколькими переменными	308
§ 5. О формулировке основных законов теории	317
Глава 11. Вариационный метод	321
§ 1. Принцип минимума	321
§ 2. Применение вариационного метода	325
§ 3. Стандартный вариационный принцип	329
§ 4. Медленные электроны в ионном кристалле	332
Глава 12. Другие задачи теории вероятностей	341
§ 1. Случайные события	341
§ 2. Характеристические функции	343
§ 3. Шумы	346
§ 4. Гауссовы шумы	351
§ 3. Спектр шума	354
§ 6. Броуновское движение	356
§ 7. Квантовая механика	360
§ 8. Функционалы влияния	364
§ 9. Функционал влияния гармонического осциллятора . .	372
§ 10. Заключение	376
Приложение. Часто применяемые интегралы	378
Литература	379

Р. ФЕЙНМАН, А. ХИБС

*Квантовая механика
и интегралы по траекториям*

СПИСОК ОПЕЧАТОК

Стр.	Строка	Напечатано	Следует читать
14	15 св.	экрана C	центра экрана C
86	15 сн.	гармоникой	частотой
145	18 св.	(6.27)	(6.26)
151	7 сн.	$V(q)$	$v(q)$
158	15 св.	рессеяния	рассеяния
292	8 сн.	$\frac{dQ}{\partial V} = \frac{\partial U}{\partial V}$	$\frac{dQ}{dV} = \frac{\partial U}{\partial V}$
363	14 св.	$\Phi[k(t)]$	$\Phi[k(t)] =$