А.Мессиа

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. Т.2

В книге рассматриваются общие вопросы квантовой механики и их многочисленные приложения. Изложение теории симметрии и инвариантности начинается с квантования момента количества движения, спина, теории сложения моментов и теоремы Вигнера — Эккарта. Для систем тождественных частиц получены статистики Бозе — Эйнштейна и Ферми — Дирака. Часть, посвященная приближенным методам в квантовой механике, содержит стационарную и нестационарную теорию возмущений. Из элементов релятивистской квантовой механики подробно рассмотрены: уравнение Дирака, квантование скалярного поля и основные понятия классической и квантовой теории излучения. В каждой главе имеются упражнения и задачи.

Книга рассчитана на широкий круг читателей — физиков и инженерно-технических работников, а также может быть полезна студентам старших курсов высших учебных заведений.

Содержание

ГЛАВА XIII. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ **13**

1. Введение 13

Раздел I. Собственные значения и собственные функции момента импульса 14

2. Определение момента импульса 14

3. Основные алгебраические соотношения 16

4. Спектр операторов $\boldsymbol{J}^2$ и J_z 17

5. Собственные векторы операторов $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. Построение инвариантных пространств $\mathcal{E}^j$ 20

6. Стандартное представление $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ 21

7. Заключение 23

Раздел II. Орбитальный момент импульса и сферические функции 24

8. Спектр операторов $\boldsymbol{l}^2$ и l_z 24

9. Определение и построение сферических функций 26

Раздел III. Момент импульса и вращения 28

10. Определение вращений. Углы Эйлера 28

11. Вращение физической системы. Оператор вращения 31

12. Вращение наблюдаемых 33

13. Момент импульса и инфинитезимальные вращения 34

14. Построение оператора $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 37

15. Вращение на угол 2π и полуцелый момент импульса 38

16. Неприводимые инвариантные подпространства. Матрицы вращений R^j 40

17. Инвариантность относительно вращений и сохранение момента импульса 42

Раздел IV. Спин 44

18. Гипотеза спина электрона 44

19. Спин 1/2 и матрицы Паули 48

20. Наблюдаемые и волновые функции частицы спина 1/2. Спинорные поля 50
21. Векторные поля и частицы спина 1 52
22. Зависящие от спина взаимодействия в атомах 54
23. Зависящие от спина нуклон-нуклонные взаимодействия 55
Раздел V. Сложение моментов импульса 57
24. Задача сложения 67
25. Теорема сложения двух моментов импульса 58
26. Приложения и примеры 60
27. Собственные векторы полного момента импульса. Коэффициенты Клебша—-Гордана 61
28. Приложение: система двух нуклонов 64
29. Сложение трех и более моментов импульса. Коэффициенты Рака. "3*sj*"-символы 67
Раздел VI. Неприводимые тензорные операторы 70
30. Представление скалярных операторов 70
31. Неприводимые тензорные операторы. Определение 71
32. Представление неприводимых тензорных операторов. Теорема Вигнера--Эккарта 74
33. Приложения 76
Задачи и упражнения 77
ГЛАВА XIV. СИСТЕМЫ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ. ПРИНЦИП ЗАПРЕТА ПАУЛИ **82**
1. Тождественные частицы в квантовой теории 82
Раздел I. Постулат симметризации 86
2. Подобные частицы и симметрическое представление 86
3. Операторы перестановки 87
4. Алгебра операторов перестановки. Симметризаторы и антисимметризаторы 89
5. Тождественные частицы и постулат симметризации 93
6. Бозоны и статистика Бозе--Эйнштейна 96
7. Фермионы и статистика Ферми--Дирака. Принцип запрета 98
8. Всегда ли необходимо симметризовать волновую функцию? 100
Раздел II. Приложения 103
9. Столкновение двух тождественных бесспиновых частиц 103
10. Столкновение протонов 107
11. Статистика атомных ядер 109
12. Сложные атомы. Приближение центрального поля 112
13. Модель атома Томаса--Ферми 115
14. Система нуклонов и изотопический спин 118
15. Использование изотопического спина. Зарядовая независимость 124
Задачи и упражнения 128
ГЛАВА XV. ИНВАРИАНТНОСТЬ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ. ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ **130**

1. Введение 130
Раздел I. Дополнительные математические сведения. Антилинейные операторы 131
2. Три полезные теоремы 131
3. Антилинейные операторы в гильбертовом пространстве 135
4. Антиунитарные преобразования 137
5. Антилинейные операторы и представления 139
Раздел II. Преобразования и группы преобразований 140
6. Преобразования динамических переменных и динамических состояний системы 140
7. Группы преобразований 144
8. Группы операторов преобразований 145
9. Непрерывные группы и инфинитезимальные преобразования. Трансляции. Вращения 146
10. Конечные группы. Отражения 150
Раздел III. Инвариантность уравнений движения и законы сохранения 152
11. Инвариантные наблюдаемые 152
12. Свойства инвариантности гамильтониана и законы сохранения 154
13. Свойства инвариантности и эволюция динамических состояний 156
14. Симметрии эффектов Штарка и Зеемана 159
Раздел IV. Обращение времени и принцип микрообратимости 161
15. Сдвиги во времени и сохранение энергии 161
16. Обращение времени в классической и квантовой механиках 162
17. Обращение времени. Частица нулевого спина 164
18. Общее определение обращения времени 166
19. Обращение времени и комплексное сопряжение 167
20. Принцип микрообратимости 169
21. Следствие: вырождение Крамерса 172
22. Вещественный гамильтониан, инвариантный относительно вращений 173
Задачи и упражнения 176
ГЛАВА XVI. СТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ 181
1. Общее введение к четвертой части 181
Раздел I. Возмущение невырожденного уровня 182
2. Разложение по степеням возмущения 182
3. Возмущение первого порядка 184
4. Основное состояние атома гелия 185
5. Кулоновская энергия атомных ядер 187
6. Поправки высших порядков 189
7. Эффект Штарка для жесткого ротатора 191
Раздел II. Возмущение вырожденного уровня 193
8. Элементарная теория 193
9. Атомные уровни без учета спин-орбитального взаимодействия 195
10. Спин-орбитальное взаимодействие. *LS*- и *jj*-связь 198

11. Атом с *LS*-связью. Расщепление за счет спин-орбитального взаимодействия 199
12. Эффект Зеемана и эффект Пашена--Бака 201
13. Симметрия H и устранение вырождения 203
14. Квазивырождение 205
Раздел III. Явные выражения для разложений по теории возмущений во всех порядках 206
15. Гамильтониан H и его резольвента $G(z)$ 206
16. Разложение $G(z)$, P и HP в ряд по степеням λV 208
17. Вычисление собственных значений и собственных функций 211
Задачи и упражнения 214
ГЛАВА XVII. ПРИБЛИЖЕННЫЕ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА 216
1. Изменение "представления" и рассмотрение части гамильтониана по теории возмущений 216
Раздел I. Нестационарная теория возмущений 219
2. Определение и вычисление по теории возмущений вероятностей переходов 219
3. Полуклассическая теория кулоновского возбуждения ядер 222
4. Случай, когда V не зависят от времени. Сохранение невозмущенной энергии 226
5. Приложение к вычислению сечений в борновском приближении 229
6. Периодическое возмущение. Резонансы 231
Раздел II. Мгновенное и адиабатическое изменения гамильтониана 232
7. Формулировка задачи и результаты 232
8. Быстрый переход и мгновенное приближение 233
9. Мгновенное обращение магнитного поля 235
10. Адиабатический переход. Общие положения. Тривиальный случай 236
11. "Представление вращающихся осей" 238
12. Доказательство адиабатической теоремы 240
13. Адиабатическое приближение 243
14. Адиабатическое обращение магнитного поля 247
Задачи и упражнения 251
ГЛАВА XVIII. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД И СВЯЗАННЫЕ С НИМ ЗАДАЧИ 254
1. Вариационный метод Ритца 254
Раздел I. Вариационный метод для связанных состояний 255
2. Вариационная форма задачи на собственные значения 255
3. Вариационное вычисление дискретных уровней 258
4. Простой пример: атом водорода 258
5. Обсуждение. Вычисление возбужденных уровней 261
6. Основное состояние атома гелия 262
Раздел II. Атомы Хартри и Фока--Дирака 265

7. Метод самосогласованного поля 265
8. Вычисление E[Ф] 265
9. Уравнения Фока--Дирака 267
10. Обсуждение результатов 270
11. Уравнения Хартри 272
Раздел III. Структура молекул 272
12. Общие понятия. Разделение движения ядер и электронов 272
13. Движение электронов в поле фиксированных ядер 275
14. Адиабатическое приближение 277
15. Гамильтониан ядер в адиабатическом приближении 280
16. Метод Борна--Оппенгеймера 283
17. Основные представления о двухатомных молекулах 284
Задачи и упражнения 290
ГЛАВА XIX. ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ 291
1. Введение 291
Раздел I. Свободная функция Грина и приближение Борна 292
2. Интегральные представления амплитуды рассеяния 292
3. Сечение рассеяния и T-матрица. Микрообратимость 295
4. Борновское приближение 297
5. Интегральное уравнение теории рассеяния 299
6. Борновское разложение 301
7. Критерий применимости борновского приближения 302
8. Упругое рассеяния электронов на атоме 304
9. Центральный потенциал. Вычисление сдвигов фаз 307
10. Функция Грина как оператор. Связь с резольвентой оператора H 308
Раздел II. Обобщение на искаженные волны 311
11. Обобщенное борновское приближение 311
12. Обобщение борновского разложения 314
13. Функция Грина искаженных волн 315
14. Приложения. Определение и формальные свойства T-матрицы 318
15. Замечания о потенциалах $1/r$ 320
Раздел III. Сложные столкновения и борновское приближение 320
16. Общие понятия. Сечения 320
17. Каналы 322
18. Вычисление сечений. T-матрицы 323
19. Интегральные представления амплитуды перехода 324
20. Борновское приближение и его обобщения 327
21. Рассеяние быстрых электронов атомом 329
22. Кулоновское возбуждение ядер 331
23. Функции Грина и интегральные уравнения для стационарных решений рассеяния 334
24. Рассеяние частицы на двух центрах 335
25. Простое рассеяние. Интерференция 338

26. Многократное рассеяние 341
Раздел IV. Вычисление амплитуд перехода вариационным методом 343
27. Стационарные выражения сдвигов фаз. Обсуждение 343
28. Вариационные вычисления сдвига фаз. Обсуждение 347
29. Распространение метода на сложные столкновения 348
Раздел V. Общие свойства матрицы перехода 350
30. Сохранение потока. *S*-матрица 350
31. Соотношение Бора--Пайерлса--Плачена (оптическая теорема) 353
32. Микрообратимость 354
33. Свойства инвариантности T-матрицы 355
Задачи и упражнения 357
ГЛАВА XX. УРАВНЕНИЕ ДИРАКА 361
Раздел I. Общее введение 361
1. Релятивистская квантовая механика 361
2. Обозначения и различные определения 362
3. Группа Лоренца 366
4. Классическая релятивистская динамика 368
Раздел II. Уравнения Клейна--Гордона и Дирака 370
5. Уравнение Клейна--Гордона 370
6. Уравнение Дирака 373
7. Построение пространства $\mathfrak{S}^s$. Представление Дирака 375
8. Ковариантная форма уравнения Дирака 377
9. Сопряженное уравнение. Определение тока 378
Раздел III. Свойства инвариантности уравнения Дирака 380
10. Свойства матриц Дирака 380
11. Инвариантность уравнения Дирака при ортохронных преобразованиях системы координат 384
12. Преобразования собственной группы 388
13. Пространственное отражение и ортохронная группа 391
14. Построение ковариантных величин 392
15. Другая формулировка свойств инвариантности: преобразование состояний 393
16. Условие инвариантности уравнения движения 394
17. Операторы преобразования. Импульс, момент импульса, четность 395
18. Законы сохранения и интегралы движения 397
19. Обращение времени и зарядовое сопряжение 398
20. Калибровочная инвариантность 401
Раздел IV. Интерпретация операторов и простые решения 401
21. Уравнение Дирака и принцип соответствия 401
22. Динамические переменные частицы Дирака 402
23. Свободный электрон. Плоские волны 405
24. Построение плоских волн посредством преобразования Лоренца 408
25. Центральный потенциал 407

26. Свободные сферические волны 410
27. Атом водорода 412
Раздел V. Нерелятивистский предел уравнения Дирака 413
28. Большие и малые компоненты 415
29. Теория Паули как нерелятивистский предел теории Дирака 417
30. Приложение: сверхтонкая структура и диполь-дипольная связь 420
31. Поправки высших порядков и преобразование Фолди--Вотхойзена 421
32. ФВ-преобразование для свободной частицы 423
33. ФВ-преобразование для частицы во внешнем поле 425
34. Электрон в центральном электростатическом потенциале 427
35. Обсуждения и выводы 428
Раздел VI. Решения с отрицательной энергией и теория позитронов 429
36. Свойства зарядово-сопряженных решений 429
37. Особое поведение решений с отрицательной энергией 431
38. Изменение интерпретации состояний с отрицательной энергией. Теория дырок и позитронов 433
39. Трудности теории дырок 435
Задачи и упражнения 436
ГЛАВА XXI. КВАНТОВЫЕ ПОЛЯ. ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ 439
1. Введение 439
Раздел I. Квантование вещественного скалярного поля 440
2. Классические свободные поля. Нормальные колебания 440
3. Квантование свободного поля 442
4. Лагранжиан поля. Импульс, сопряженный к $\Phi(r)$ 445
5. Комплексные базисные функции 449
6. Плоские волны. Определение импульса 451
7. Сферические волны. Определение момента импульса 456
8. Пространственное отражение и обращение времени 457
Раздел II. Взаимодействие с атомной системой 457
9. Взаимодействие с системой частиц 457
10. Слабая связь и рассмотрение по теории возмущений 461
11. Сдвиги уровней 464
12. Излучение квантов 468
13. Квантовая теория распадающихся состояний. Ширина линии 470
14. Упругое рассеяние. Дисперсионная формула 477
15. Резонансное рассеяние. Образование метастабильного состояния 481
16. Поглощение кванта (фотоэлектрический эффект). Радиационный захват 483
Раздел III. Классическая теория электромагнитного излучения 485
17. Уравнения классической теории Максвелла--Лоренца 485
18. Инвариантность и законы сохранения классической теории 487
19. Собственная энергия и классический радиус электрона 489
20. Электромагнитный потенциал. Выбор калибровки 490
21. Продольная и поперечная часть векторного поля 491

22. Исключение продольного поля 494
23. Энергия, импульс, момент импульса 496
24. Гамильтониан свободного электромагнитного поля 500
25. Гамильтониан излучения, взаимодействующего с частицами 502
Раздел IV. Квантовая теория излучения 503
26. Квантование свободного поля излучения. Фотоны 503
27. Плоские волны. Импульс излучения 504
28. Поляризация 505
29. Разложение по мультиполям. Фотоны с определенным моментом импульса и четностью 506
30. Взаимодействие с атомной системой 509
31. Излучение фотона атомом. Дипольное излучение 513
32. Комптоновское рассеяние при низких энергиях. Формула Томсона 516
Задачи и упражнения 520
Дополнение В. Коэффициенты векторного сложения и матрицы вращения 524
Раздел I. Коэффициенты Клебша--Гордана (К.-Г.) и "3j"-символы 524
Раздел II. Коэффициенты Рака и "6j"-символы 530
Раздел III. "9j"-символы 534
Раздел IV. Матрицы вращения 536
Раздел V. Неприводимые тензорные операторы 542
Дополнение Г. Элементы теории групп 545
Раздел I. Основные понятия 545
Раздел II. Линейные представления группы 548
Раздел III. Конечные группы 559
Раздел IV. Перестановки (группа $\mathcal{P}^n$) 567
Предметный указатель **580**

Предметный указатель

Адиабатическая теорема 233, 237, 240, 243
Адиабатический переход 232, 236, 239
Адиабатическое приближение 243, 247, 273, 277, 284
Алгебра групповая 660
Амплитуда перехода 296
- - борновское приближение 327
- - вычисление вариационным методом 343, 350
- - интегральное представление 324
- рассеяния 107, 292
- - вперед 353
- - интегральное представление 293, 295
Антисимметризатор 89, 93, 120, 128, 266, 569
- группы перестановок 569
- Юнга 571
Атом водорода 214, 251, 412, 415
- - основное состояние 258, 261
- гелия 185, 187
- - основное состояние 261, 262
- сложный 112
- углерода 197
- Фока--Дирака 265, 272
- Хартри 265, 272
Атомные уровни 195, 197
Бозон 95, 98, 103, 290
Бозонный газ 97
Бета-распад 125, 159

Вакуум 443, 444, 461
Вектор антисимметричный относительно перестановок 91
- ковариантный 363
- контравариантный 363
- нулевой 364
- пространственно-подобный 364
- симметричный, относительно перестановок 91
вектор, времениподобный, 4, 364
- энергии-импульса 395, 396
Векторное поле 52, 54
- - поперечная часть 491
- - продольная часть 491, 494
Вероятность перехода 219, 221
Вещественные нормальные координаты 601
Взаимодействие, зависящее от спина 54, 57
- излучения с частицей 509
- нуклон-нуклонное 55, 57
- поля и частицы 457
- спин-орбитальное 54, 198, 199, 420
Возбуждение ядер, кулоновское 222, 226, 331
Возмущение вырожденного уровня 193, 206
- невырожденного уровня 182, 193
- первого порядка 184, 185
- периодическое 231, 232
Волна искаженная 311, 320
- плоская 405, 407, 451, 504
- свободная сферическая 410, 411
Волновая функция частицы спина 1/2, 50
- - - двухкомпонентная 51
Вращение 13, 28, 36, 536
- инфинитезимальное 29, 34, 36
- наблюдаемых 33, 34
- на угол 2п, 38, 40
Вращения матрица 30, 41, 536, 537
- оператор 31, 33, 536
Время жизни состояния 469, 475
- собственное 368
Вырождение 473
- Крамерса 172, 173
- обменное 84, 85, 94
- ротационное 43
- уровней 113
G-вырождение 154, 173
Газ бозонный 97
- фермионный 99
Гамильтониан атома в постоянном магнитном поле 55
- Дирака 374, 405
- - частицы в центральном потенциале 407
- - - во внешнем поле 375
- свободного электромагнитного поля 500
Гамма-излучение атома 76
Гамма-матрица 377, 380, 384
Гипотеза эргодическая 97
Гиромагнитное отношение 45
Гомоморфизм группы 548
Градиент ковариантный 365
- контравариантный 365
Группа 545
- абелева 546
- Галилея 145, 177
- изотопических вращений 144
- коммутативная 546
- конечная 546, 559
- линейных подстановок 548
- Лоренца 366
- - неоднородная 365
- - полная 366
- - ортохронная 366, 384, 388, 391
- - собственная з91, 367, 388
- непрерывная 146, 546
- операторов преобразования 145, 146
- перестановок 144, 567
- полупростая 548
- преобразований 140, 145
- простая 548
- пространственных преобразований

144
- Пуанкаре 366
Диаграмма Юнга 570, 576
Диамагнитный член 55
Длина рассеяния 348
Дырка 435
Задача на собственные значения 255, 257
Закон Лоренца 476
- распада, экспоненциальный 469
- сохранения 154, 156
- - изотопического спина 156
- - импульса 398
- - момента импульса 155
- - полного импульса 155
- - - момента импульса 398, 488
- - симметрии относительно перестановок 155
- - четности 155, 398
- - энергии 161
- - энергии-импульса 488
Зарядовая независимость 124, 128, 156
Зарядовое сопряжение 399, 401, 429
Захват радиационный 483
Излучение кванта 468
Гамма-излучение атома 76
Изоморфизм групп 548
Изотропность пространства 159
Импульс излучения 496, 504
- механический 368
- поля 451, 456, 488
- сопряженный, классического поля 445
Инвариантное подпространство представления 551
Инвариантность относительно перестановок 155
- по отношению к вращениям 40, 44, 155, 159
Индекс ковариантный 363
- контравариантный 363
- подгруппы 560
Интеграл движения 154, 397, 398
Интерференция 340
Искаженная волна 311, 320
Калибровка радиационная 491
Калибровочная инвариантность 401
Калибровочное преобразование 490
- - Лоренца 491
Канал реакции 322
- - входящий 322
- - открытый 323
Катастрофа ультрафиолетовая 512
Квазивырождение 295
Квантовое поле 362, 439
Класс смежности 544
- сопряженных элементов группы 546, 560
Ковариантная компонента тензора 313
Ковариантный вектор 363
- градиент 365
- индекс 363
Константа связи 458
Контравариантная компонента тензора 363
Контравариантный вектор 363
- градиент 365
- индекс 363
Конус световой 365
Координата нормальная 440, 442, 501
Коэффициенты векторного сложения 61, 67
- Клебша--Гордана 61, 67, 74, 76, 175, 524, 528, 532
- - - свойства симметрии 64, 526
- - - соотношение ортогональности 63, 526
- Рака 67, 70, 530, 531
Кулоновская энергия атомных ядер 187, 189
Кулоновское возбуждение ядер 222, 226, 331
Лагранжиан поля 445
Лемма Шура 143, 552

Магнетон Бора 46
Магнитный момент атома 45
- - внутренний 54
Масса отрицательная 371
- релятивистская 368, 404
Матрица перехода 296, 312, 350, 357
S-матрица 353
T-матрица 295, 318, 323
- , свойства инвариантности 355
Матрицы вращения 30, 41
- Дирака 377, 380, 384
- Паули 48
Гамма-матрицы 377, 380, 384
Метод Блоха 213
- Борна--Оппенгеймера 274, 283, 284
- вариационный 254, 290
- - Ритца 254, 255
- - для связанных состояний 255, 257
- Като 206, 213
- Томаса--Ферми 112, 115, 118
Метрика псевдоевклидова 363
Метрический тензор 363
Микрообратимость 354
- упругого рассеяния 297
Множитель Ланде 46, 47, 202, 214
Модель атома Томаса--Ферми 115, 118, 199
Молекула двухатомная 284, 290
Момент импульса 13, 81, 524
- - излучения 496
- - инвариантное подпространство 20, 21
- - коммутационные соотношения 14, 15
- - орбитальный 24, 26
- - - , собственные состояния 26
- - - - , спектр 24, 26
- - полный 404, 537
- - - , собственные векторы 61
- - полуцелый 38, 40
- - поля 489
- - - орбитальный 498
- - , собственные значения 17, 20, 23, 24
- - - , функции 20, 21
- - , сохранение 42
- - , спектр 17, 20, 24
- - , стандартное представление 21, 23
- магнитный 75, 420
Момент мультипольный 75, 77
- спина 404
- электрический 76
Море Дирака 435
Наблюдаемые инвариантные 558
- частиц спина 1/2, 50
Неприводимость по отношению к вращениям 40, 41
Нормальные координаты 440, 442, 501
Нуклон 119
Нуль-вектор 364
Обращение времени 161, 178, 307, 398, 401, 457
- магнитного поля адиабатическое 247, 251
- - - мгновенное 235, 236
Однородность пространства 158
Оператор антилинейный 131, 135, 137, 139, 140
- антисимметризации 89, 93, 120, 155
- антиунитарный 138, 141, 166
- векторный 14, 15
- Даламбера 365
- зарядового сопряжения 398
- комплексного сопряжения 139, 167, 169, 398
- перестановок 86, 96
- преобразования 145, 146, 395
Оператор рождения 443, 449, 504, 505
- симметризации 89, 93, 96, 120, 155
- скалярный 70, 71
- спина 369
- тензорный неприводимый 70, 77, 542, 544
- уничтожения 443, 449, 504, 505

- четности 397
- числа частиц 444, 449
- эволюции 93, 95, 181, 217, 219, 470
Орбитальные переменные 60
Основное состояние 443, 444, 461, 463
Отношение гиромагнитное 45
Отражение координат 161, 367, 391, 457
Переменные орбитальные 50
- спиновые 50
Перенормировка массы 467, 489
Перестановка 567
- циклическая 568
Переход адиабатический 232, 236, 239
- мгновенный 232, 236
- радиационный 463, 469
Плотность тока 404
- тока, 4, 379
Поглощение кванта 483
Подгруппа 547, 560
- инвариантная 547
- индекс 560
- сопряженная 547
Подобные частицы 86, 93
Подпространство инвариантное 205, 551
Позитрон 435
Поле векторное 52, 54
- - поперечная часть 491
- - продольная часть 491, 494
- квантовое 362, 439, 442
- - свободное 442
- скалярное классическое 440
- спинорное 50, 51
Поляризация круговая и линейная 505
Поправка второго порядка 464
- высшего порядка 189, 191, 421
Порядок группы 546
Постоянная тонкой структуры 466
Постулат симметризации 85, 96, 98, 110
Потенциал Гаусса 357
- Морса 288, 291
- центральный 307, 407, 410
- электромагнитный 365, 490
- Юкавы Э 57
Правило отбора 62, 75
- Хунда 197
Представление вещественное 168
- вполне приводимое 551
- вращающихся осей 238, 239
- Дирака Э 75, 377
- единичное 549
- линейное 548
- неприводимое 551, 561
- приводимое 551
- регулярное 561, 563, 564
- симметрическое 86, 88
- сопряженное 549
- стандартное 554
- тривиальное 549
- унитарное 549
Представления эквивалентные 549
Преобразование 140
- антилинейное 137
- антиунитарное 138, 141
- калибровочное 490
- - лоренцево 491
- Фолди--Вотхойзена 421, 427
Приближение адиабатическое 243, 247, 273, 277, 284
Приближение борновское 229, 297, 299, 327
- - критерий применимости 302
- - обобщенное 311, 327, 328
- независимых частиц 112
- слабой связи 476
- центрального поля 112, 114, 195
Принцип микрообратимости 161, 169, 172
- наименьшего действия 446
- соответствия 401
Произведение скалярное векторов, 3,

364
- - векторов, 4, 364
Пространство--время 363
Прямая сумма представлений 550
Радиационный захват 483
Радиус электрона классический 489
Разбиение целого числа 569
Разложение борновское 301, 304, 311
- - обобщенное 314
Размерность представления 549
Рассеяние быстрых электронов на атомах 329
- двукратное, амплитуда 341
- интегральное представление решения 334
- многократное 341
- неупругое 320
- простое 338
- резонансное 481
- упругое 304, 320
- частицы на двух центрах 335, 336
Резольвента 207, 210, 471, 483
Резонанс 231, 232
Решение с отрицательной энергией 431, 438
Ротатор жесткий 191, 193
Сверхтонкая структура 55
Связь диполь-дипольная 420
- Рассела--Саундерса 198, 202, 214, 235
- слабая 461
jj-связь 214
LS-связь 198, 202, 214, 235
Сдвиг во времени 161
- лэмбовский 415
- уровня 464
- фаз, стационарное выражение 343
- - вариационное вычисление 347
Сечение рассеяния 107, 108, 295, 321
- - геометрическое 304
- - дифференциальное 298
- - неупругого в борновском приближении 330
- - полное 105, 298
- - Резерфорда 224
Сила Лоренца 368, 495
- тензорная 56, 66
Символы Вигнера 69, 530
- <"3j>" 524
- <" 6j>", 69, 530, 532, 535
- <" 9j>>, 69, 534
- << 3nj">, 67
Симметризатор 89, 93, 96, 120, 128, 569
- группы перестановок 569
- Юнга 571
Симметрия 13
Система тождественных частиц 82, 129
Скобки Пуассона 147
скорость, 4, 369
Сложение моментов импульса 57, 70, 524, 544
- спинов 1/2, 60
Собственная энергия электрона электростатическая 489
Соотношение Бора--Пайерлса--Плачека 353, 354
Соотношение Дирака 127
- микрообратимости для *T*-матрицы 354
- ортогональности 562
Сопряженная подгруппа 547
Сопряженные элементы группы 546
Состояние виртуальное 221
- динамическое 256, 259
- микроскопическое 97
- метастабильное 481
- микроскопическое 97
- основное 443, 444, 461, 463
- собственное вырожденное 470
- - невырожденное 470, 473
- с отрицательной энергией 431, 435
Спектр полосатый 111
Спин 13, 44
- изотопический 118, 128

- - полный 120
- поля 498
- ядра 109
- 1/2, 48, 55
- 1, 50
Спиновые переменные 50
Спинор 50, 391
Спинорное поле 50, 51
Статистика атомных ядер 109, 111
- Бозе--Эйнштейна 96, 98, 503
- Ферми--Дирака 98, 100
Столкновение двух тождественных частиц 103, 109
- протонов 107
- сложное 348
- с перераспределением 321
Структура молекул 272, 290
- сверхтонкая 420
Сферические функции 26, 28
- - условия на фазу 26
Таблица Юнга 570
Тензор 71
- метрический 363
- неприводимый 71, 72
- приводимый 71, 72
- электромагнитного поля 365, 369
- энергии-импульса 487
- $\varepsilon^{\mu\nu\lambda\rho}$ 365
Тензорное произведение представлений 551, 563
Теорема адиабатическая 233, 237, 240, 243
- Вигнера--Эккарта 74, 75, 77, 200, 201, 225
- оптическая 353
- сложения моментов импульса 58, 61
- - - - основная 59, 60
- Эренфеста 233, 237, 240, 243
Теория возмущений нестационарная 219, 232
- - стационарная 181, 215
- излучения 439, 503, 520
- Максвелла--Лоренца 485
- Паули 48, 417
- рассеяния 291, 358
- - интегральное уравнение 299, 301
Трансляционная инвариантность 155, 158
Транспозиция 569
Тритон 252
Угловой момент 14
Углы Эйлера 28, 31, 37, 536
Уравнение Дирака 361, 438
- - в ковариантной форме 377
- - инвариантность 384, 388
- - нерелятивистский предел 415, 417
- - сопряженное 379
- Клейна--Гордона 370, 373, 401, 436, 438, 441
Уравнение Лагранжа 446
- Лоренца 485
- Пуассона 115
- Фока--Дирака 267, 270
- Хартри 272
- Шредингера 93, 106, 240
- - нестационарное 202, 253
Уравнения гамильтоновы классической релятивистской частицы 369
- Максвелла 488
Условие Лоренца 491
Фазовый множитель, выбор 525
Фактор-группа 547
Фермионный газ 99
Фермионы 95, 98, 104, 290
Физическая наблюдаемая 39, 40
Формула Вигнера 80, 539, 540
- Мотта 108
- Рака 528, 533
- Резерфорда 306
Форм-фактор плотности электронов 305
Фотон 460, 503, 506
Фотоэлектрический эффект 252, 483, 522
Функция антисимметричная

относительно перестановок 84
- базисная комплексная 499
- Гамильтона классической релятивистской частицы 369
- Грина 292, 307, 308, 315, 334, 344, 481
- - искаженных волн 315, 318
- - как оператор 308
- Грина, разложение 307
- - свободная 292, 311
- Лагранжа 446
- обрезающая 459
- симметричная относительно перестановки аргументов 84
- сферическая 26, 28, 74, 540
- - условие на фазу 26
- Томаса--Ферми 117
Характер 549, 561
Частица в статическом потенциале 163, 164
- спина 1/2, 50, 52
- спина 1, 52, 54
Частицы тождественные 82
Частота Бора 219, 246, 476
Четность 155, 404
- - перестановки 90
Ширина линии 470
Эквивалентные представления 549
Эксперимент Штерна--Герлаха 47
Электрон в кулоновском поле 412, 415
- - центральном электростатическом потенциале 427
- - электромагнитном поле 54, 420
- свободный 405
Энергия 404
- излучения 496
- отрицательная 431
- поля 488
Эргодическая гипотеза 97
Эффект Зеемана 46, 159, 161, 201, 214
- - аномальный 47
- Пашена--Бака 203, 235
- Рамзауэра--Таунсенда 304
- фотоэлектрический 252, 483, 522
- Штарка 159, 285
- - для жесткого ротатора 304

Ах, душенька! До какой степени
у твоего отца дух погряз в материи!

Ж. Б. Мольер. «Смешные жеманницы», VI

ЧАСТЬ III

СИММЕТРИИ И ИНВАРИАНТНОСТЬ

ГЛАВА XIII

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

§ 1. Введение

Свойства симметрии уравнений движения в квантовой механике играют столь же большую роль, как и в классической механике. Систематическое изучение симметрии и ее следствий будет проведено с общей точки зрения в главе XV. Настоящая глава посвящена симметрии по отношению к вращениям — одному из наиболее важных видов симметрии. В квантовой механике, так же как и в классической, вращение системы связано с ее моментом импульса, и из инвариантности уравнений движения относительно вращений следует закон сохранения момента импульса. Различия с классической механикой возникают из-за того, что момент импульса не является теперь обычным вектором, а состоит из трех некоммутирующих операторов — компонент векторного оператора.

В разделе I мы определяем момент импульса правилами коммутации его компонент J_x, J_y, J_z (соотношения (3)) и исследуем задачу на собственные значения операторов $\boldsymbol{J}^2$ и J_z, пользуясь только этими правилами и утверждением, что все три компоненты являются наблюдаемыми. Этот подход, предложенный Дираком, во многом аналогичен рассмотрению гармонического осциллятора в главе XII.

Раздел II посвящен специальному случаю — орбитальному моменту импульса частицы и построению соответствующих собственных функций (сферических функций).

В разделе III устанавливается связь между вращениями и оператором момента импульса. Вращение физической системы описывается посредством некоторого оператора, который зависит от компонент полного момента, и его вид определяется уравнением (60). Доказывается, что инвариантность уравнений движения относительно вращений эквивалентна обращению в нуль коммутаторов гамильтониана с тремя компонентами оператора момента, откуда следует закон сохранения момента импульса.

Эксперимент показывает, что большинство частиц обладает внутренним моментом импульса — спином. Понятие спина рассматривается в разделе IV.

Раздел V посвящен важному вопросу сложения моментов импульса.

Различные операторы квантовой механики можно характеризовать в соответствии с законом их преобразования при вращениях. В частности, существуют скалярные операторы (инвариантные относительно вращений), векторные операторы и, вообще говоря, неприводимые тензорные операторы, трансформационные свойства которых особенно просты. Эти операторы характеризуются также простыми коммутационными соотношениями с компонентами оператора момента, откуда следуют некоторые важные свойства их представлений (теорема Вигнера — Эккарта). Все это рассматривается вместе с основными приложениями в разделе VI и последнем разделе этой главы.

Дополнение В к настоящей главе содержит наиболее важные формулы и основные свойства различных коэффициентов, связанных с вращениями и сложением моментов импульса.

Раздел I. СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА

§ 2. Определение момента импульса

Мы уже встречались с оператором момента импульса при рассмотрении квантовых систем одной частицы. По определению, момент импульса частицы равен

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \tag{1}$$

где $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ — векторы координаты и импульса данной частицы. В волновой механике $\boldsymbol{l}$ представляется векторным оператором [1] $(-i)\boldsymbol{r} \times \nabla$, три компоненты которого являются дифференциальными операторами, удовлетворяющими следующим правилам коммутации:

$$[l_x, l_y] = il_z, \quad [l_y, l_z] = il_x, \quad [l_z, l_x] = il_y. \tag{2}$$

Каждая из компонент коммутирует с квадратом углового момента

$$\boldsymbol{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2,$$

т. е.

$$[\boldsymbol{l}, \boldsymbol{l}^2] = 0.$$

Эти свойства были получены в § V.18. Напомним, что последнее равенство является простым следствием соотношений (2).

---

[1]) В настоящей главе используется система единиц, в которой $\hbar = 1$.

Операторы $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{l}$ — *векторные*. Векторный оператор $\boldsymbol{B}$ определяется своими компонентами B_x, B_y, B_z по трем ортогональным осям, где B_x, B_y, B_z — операторы в обычном смысле этого слова. При заданных трех компонентах мы можем определить компоненту B_u оператора $\boldsymbol{B}$ в произвольном направлении $\boldsymbol{u}$, задаваемом единичным вектором $\boldsymbol{u}(u_x, u_y, u_z)$:

$$B_u \equiv (\boldsymbol{uB}) = u_x B_x + u_y B_y + u_z B_z.$$

Таким образом, мы можем определить компоненты векторного оператора $\boldsymbol{B}$ по ортогональным осям любой другой системы координат. Различные операции векторной алгебры (сложение, скалярное произведение, векторное произведение и т. д.) переносятся на векторные операторы без изменения.

Рассмотрим квантовую систему N частиц. Как и выше, мы можем определить момент n-й частицы $\boldsymbol{l}^{(n)} = \boldsymbol{r}^{(n)} \times \boldsymbol{p}^{(n)}$. Полный момент импульса системы является векторной суммой моментов N частиц

$$\boldsymbol{L} = \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{l}^{(n)}.$$

Так как каждый отдельный момент импульса удовлетворяет коммутационным соотношениям (2), а компоненты любого из них коммутируют с компонентами всех других, то мы имеем

$$[L_x, L_y] = \sum_n \sum_{n'} [l_x^{(n)}, l_y^{(n')}] = \sum_n [l_x^{(n)}, l_y^{(n)}] = i \sum_n l_z^{(n)} = iL_z.$$

Аналогично получаются еще два соотношения, возникающие после циклической перестановки индексов. Таким образом, компоненты полного момента импульса удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, что и компоненты индивидуальных моментов.

Тем самым мы пришли к следующему определению момента импульса: *векторный оператор $\boldsymbol{J}$ называется оператором момента импульса, если его компоненты являются наблюдаемыми и удовлетворяют коммутационным соотношениям*

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y. \tag{3}$$

Из этих трех соотношений мы можем вывести аналогичные соотношения для компонент $\boldsymbol{J}$ вдоль любой другой системы осей. Пусть J_u, J_v, J_w компоненты $\boldsymbol{J}$ по трем ортогональным осям, единичные векторы которых $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{w}$ ориентированы так, что $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v}$. Тогда несложно доказать соотношение

$[J_u, J_v] = iJ_w$ и два других, получающихся циклической перестановкой индексов [1]).

Если $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ — любые два вектора (или два векторных оператора, коммутирующие друг с другом и с $\boldsymbol{J}$), то имеем более общее соотношение

$$[\boldsymbol{aJ}, \boldsymbol{bJ}] = i((\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b})\boldsymbol{J}). \tag{4}$$

§ 3. Основные алгебраические соотношения

Квадрат момента импульса

$$\boldsymbol{J}^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

коммутирует с J_x, J_y и J_z. Это свойство является следствием коммутационных соотношений (3) и может быть выведено тем же способом, что и аналогичное свойство для введенного в § 2 момента импульса $\boldsymbol{l}$. Символически запишем

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}^2] = 0. \tag{5}$$

Как следствие, $\boldsymbol{J}^2$ коммутирует с произвольной функцией компонент векторного оператора $\boldsymbol{J}$.

Введем два эрмитово сопряженных друг другу оператора

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y. \tag{6}$$

Три оператора J_+, J_- и J_z полностью определяют векторный оператор $\boldsymbol{J}$ и оказываются более удобными для алгебраических манипуляций, чем J_x, J_y и J_z. Их коммутационные соотношения можно вывести из соотношений (3)

$$[J_z, J_+] = J_+, \tag{7а}$$

$$[J_z, J_-] = -J_-, \tag{7б}$$

$$[J_+, J_-] = 2J_z. \tag{7в}$$

---

[1]) Эти соотношения можно записать в компактной форме ($i, j, k = u, v$ или w)

$$[J_i, J_j] = i\sum_k \varepsilon_{ijk} J_k \quad \text{или} \quad \sum_{ij} \varepsilon_{ijk} J_i J_j = iJ_k,$$

где ε_{ijk} — полностью антисимметричный тензор:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0, & \text{если два индекса равны;} \\ +1, & \text{если } i, j, k \text{ получаются четной перестановкой из } u, v, w; \\ -1, & \text{если } i, j, k \text{ получаются нечетной перестановкой из } u, v, w. \end{cases}$$

Вторая форма эквивалентна соотношению между векторными операторами

$$\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{J} = i\boldsymbol{J}.$$

Из равенства (5) следует

$$[J^2, J_+] = [J^2, J_-] = [J^2, J_z] = 0. \tag{8}$$

Для J^2 имеем

$$J^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2,$$

откуда, используя (7с), получаем два тождества

$$J_-J_+ = J^2 - J_z(J_z + 1), \tag{9а}$$

$$J_+J_- = J^2 - J_z(J_z - 1). \tag{9б}$$

§ 4. Спектр операторов J^2 и J_z

Так как J^2 коммутирует с каждой компонентой векторного оператора J, то можно построить полный набор собственных функций J^2 и одной из компонент, например, J_z. Тот факт, что J_x, J_y и J_z — *эрмитовы* операторы, удовлетворяющие *коммутационным соотношениям* (3), накладывает жесткие ограничения на спектр собственных значений.

Оператор J^2 — положительно определен и эрмитов, так как он является суммой положительно определенных эрмитовых операторов [1]). Его собственные значения с необходимостью положительны (или равны нулю). Следовательно, их можно представить в форме $j(j+1)$ и параметризовать вещественным квантовым числом $j \geqslant 0$.

Пусть $|jm\rangle$ — какой-либо собственный вектор операторов J^2 и J_z, отвечающий собственным значениям $j(j+1)$ и m соответственно. Будем говорить, что $|jm\rangle$ определяет состояние с моментом импульса (jm). Если J^2 и J_z не образуют полного набора коммутирующих наблюдаемых, то могут существовать несколько линейно-независимых состояний (jm). В этом случае $|jm\rangle$ — один из кет-векторов, выбранный в подпространстве, соответствующем моменту импульса (jm). Рассуждение, следующее ниже, справедливо для любого такого вектора. Единственные условия, которым должен удовлетворять вектор $|jm\rangle$, следующие:

$$J^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle,$$

$$J_z|jm\rangle = m|jm\rangle.$$

---

[1]) Это следствие эрмитовости операторов J_x, J_y и J_z. Для любого $|u\rangle$, $\langle u|J_x^2|u\rangle \geqslant 0$ как норма вектора $J_x|u\rangle$. Операторы J_y^2 и J_z^2 обладают тем же свойством, поэтому $\langle u|J^2|u\rangle \geqslant 0$ для любого $|u\rangle$.

Рассмотрим векторы $J_+|jm\rangle$ и $J_-|jm\rangle$. Из тождеств (9а) и (9б) имеем

$$J_-J_+|jm\rangle = [j(j+1) - m(m+1)]|jm\rangle \equiv (j-m)(j+m+1)|jm\rangle, \tag{10а}$$

$$J_+J_-|jm\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]|jm\rangle \equiv (j+m)(j-m+1)|jm\rangle. \tag{10б}$$

Тем самым нормы векторов $J_+|jm\rangle$ и $J_-|jm\rangle$ равны

$$\langle jm|J_-J_+|jm\rangle = (j-m)(j+m+1)\langle jm|jm\rangle,$$
$$\langle jm|J_+J_-|jm\rangle = (j+m)(j-m+1)\langle jm|jm\rangle.$$

В силу одной из аксиом гильбертова пространства эти нормы не могут быть отрицательны и, следовательно,

$$(j-m)(j+m+1) \geqslant 0, \quad (j+m)(j-m+1) \geqslant 0,$$

отсюда

$$-j \leqslant m \leqslant j.$$

Более того, так как равенство нулю нормы есть необходимое и достаточное условие равенства нулю вектора, то имеем $J_+|jm\rangle = 0$ тогда и только тогда, когда $(j-m)(j+m+1)=0$; точно так же $J_-|jm\rangle = 0$ тогда и только тогда, когда $(j+m)(j-m+1) = 0$. Поскольку m обязательно находится в интервале $(-j, +j)$, эти условия сводятся к $m = j$ и $m = -j$ соответственно.

Если $m \neq j$, то (отличный от нуля) вектор $J_+|jm\rangle$ является вектором с моментом импульса $(j, m+1)$. Используя (8), получаем

$$\boldsymbol{J}^2 J_+|jm\rangle = J_+\boldsymbol{J}^2|jm\rangle = j(j+1)J_+|jm\rangle$$

и так как согласно (7а)

$$J_zJ_+ = J_+(J_z+1), \tag{11а}$$

то мы имеем

$$J_zJ_+|jm\rangle = J_+(J_z+1)|jm\rangle = (m+1)J_+|jm\rangle.$$

Используя тот факт, что J_- коммутирует с $\boldsymbol{J}^2$, и то, что согласно (7б)

$$J_zJ_- = J_-(J_z-1), \tag{11б}$$

получаем аналогичный результат для $J_-|jm\rangle$.

В результате мы доказали важную теорему:

Если $|jm\rangle$ *— вектор с моментом импульса* (jm) *и нормой* N, *то*

(i) $-j \leqslant m \leqslant j$; (12)

(ii) если $m = j$, то $J_+|jm\rangle = 0$;

если $m \neq j$, *то* $J_+|jm\rangle$ — *вектор с моментом импульса* $(j, m+1)$ *и нормой* $[j(j+1) - m(m+1)]N$;

(iii) *если* $m = -j$, *то* $J_-|jm\rangle = 0$;

если $m \neq -j$, *то* $J_-|jm\rangle$ — *вектор с моментом импульса* $(j, m-1)$ *и нормой* $[j(j+1) - m(m-1)]N$.

Рассмотрим теперь векторы, получаемые последовательным действием оператора J_+ на вектор $|jm\rangle$:

$$J_+|jm\rangle,\ J_+^2|jm\rangle,\ \ldots,\ J_+^p|jm\rangle,\ \ldots \tag{13}$$

Известно, что $-j \leqslant m \leqslant j$. Если $m = j$, то $J_+|jm\rangle = 0$. Если $m < j$, то $J_+|jm\rangle$ — ненулевой вектор с моментом $(j, m+1)$. Следовательно, он обладает всеми свойствами (i)—(iii), характерными для любого общего собственного вектора операторов J^2 и J_z, а значит, $m + 1 \leqslant j$. Если $m + 1 = j$, то $J_+^2|jm\rangle = 0$. Если же $m + 1 < j$, то $J_+^2|jm\rangle$ — ненулевой вектор с моментом $(j, m+2)$ и также обладает свойствами (i), (ii) и (iii). Таким образом, можно последовательно продолжать анализ свойств векторов (13). Ясно, что эта последовательность должна когда-то оборваться, в противном случае мы смогли бы построить собственные векторы J_z, отвечающие собственным значениям, превосходящим любое наперед заданное число, что противоречит неравенствам (12), согласно которым значения m не могут быть больше j. Следовательно, существует целое число $p \geqslant 0$ такое, что $J_+^p|jm\rangle$ — ненулевой вектор с моментом импульса $(j, m+p)$, действуя на который оператором J_+ получаем нуль. Тем самым имеем $m + p = j$. Итак, мы показали, что $(j - m)$ — целое число $(\geqslant 0)$ и что p векторов

$$J_+|jm\rangle,\ J_+^2|jm\rangle,\ \ldots,\ J_+^p|jm\rangle \tag{14}$$

описывают состояния с определенным моментом импульса, отвечающие собственному значению $j(j+1)$ оператора J^2 и собственным значениям

$$m+1,\ m+2,\ \ldots,\ m+p = j$$

оператора J_z соответственно.

Подобное рассмотрение векторов, получаемых последовательным применением оператора J_- к вектору $|jm\rangle$, показывает, что $j + m \equiv q$ также является целым числом $(\geqslant 0)$ и что q векторов

$$J_-|jm\rangle,\ J_-^2|jm\rangle,\ \ldots,\ J_-^q|jm\rangle \tag{15}$$

описывают состояния с определенным моментом импульса, отвечающие собственному значению $j(j+1)$ оператора J^2 и собственным значениям

$$m-1,\ m-2,\ \ldots,\ m-q = -j$$

оператора J_z соответственно. Так как p и q — неотрицательные целые числа, то их сумма $p+q=2j$ также является неотрицательным целым числом.

Объединяя эти утверждения, получаем следующую основную теорему:

(A) *Собственные значения оператора* J^2 *имеют вид* $j(j+1)$, *где* j *— неотрицательное целое или полуцелое*[1] *число*

$$j=0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ 2,\ \ldots$$

(B) *Собственными значениями оператора* J_z *могут быть только целые или полуцелые числа*

$$m=0,\ \pm 1/2,\ \pm 1,\ \pm 3/2,\ \pm 2,\ \ldots$$

(C) *Если* $j(j+1)$ *и* m *— собственные значения операторов* J^2 *и* J_z, *отвечающие общему собственному вектору этих двух операторов, т. е. состоянию с моментом импульса* (jm), *то возможны следующие* $(2j+1)$ *значений* m:

$$-j,\ -j+1,\ \ldots,\ +j.$$

§ 5. Собственные векторы операторов J^2 и J_z. Построение инвариантных пространств $\mathscr{E}^{(j)}$

Взяв вектор $|jm\rangle$ с определенным моментом импульса, можно построить все $(2j+1)$ собственных векторов операторов J^2 и J_z последовательным применением операторов J_+ и J_-. Вообще говоря, эти векторы не нормированы на единицу, однако легко построить нормированные векторы, поступая следующим образом.

Допустим, что норма $|jm\rangle$ равна единице. Тогда, если $m=j$, то вектор $J_+|jm\rangle$ равен нулю; если $m<j$, то $J_+|jm\rangle$ — вектор с моментом импульса $(j,\ m+1)$. Обозначим $|jm+1\rangle$ нормированный вектор, определяемый равенством

$$J_+|jm\rangle = c_m|jm+1\rangle.$$

Из приведенного выше выражения для нормы $J_+|jm\rangle$ следует, что

$$|c_m|^2=[j(j+1)-m(m+1)].$$

Фиксируем фазу вектора $|jm+1\rangle$ так, чтобы c_m было вещественным и положительным числом. Тогда

$$J_+|jm\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,|jm+1\rangle.$$

---

[1]) В этой книге под «полуцелыми» подразумеваются числа вида $\frac{1}{2},\ \frac{3}{2},\ \frac{5}{2},\ \ldots$.

Действуя на обе части оператором J_- и используя (10а), получаем

$$J_-|\,j\ m+1\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,|jm\rangle.$$

С вектором $|jm+1\rangle$ можно поступить точно так же. Достаточно заменить всюду m на $m+1$. Если $m+1=j$, то $J_+|jm+1\rangle = 0$. Если $m+1 \neq j$, то мы получим вектор $|jm+2\rangle$ с моментом импульса $(j,\ m+2)$ и единичной нормой, фаза которого фиксирована тем же способом. Этот процесс может быть продолжен до тех пор, пока не получим вектор $|jj\rangle$.

Таким же образом, применяя последовательно оператор J_- к вектору $|jm\rangle$, строим нормированные векторы $|jm-1\rangle$, ..., $|j-j\rangle$ с моментами импульса $(j,\ m-1)$, ..., $(j,\ -j)$ соответственно.

Итак, исходя из $|jm\rangle$, мы построили $(2j+1)$ ортонормированных векторов

$$|jj\rangle,\ |j\,j-1\rangle,\ \ldots,\ |jm\rangle,\ \ldots,\ |j-j\rangle, \tag{16}$$

которые удовлетворяют уравнениям на собственные значения

$$\boldsymbol{J}^2|\,j\mu\rangle = j(j+1)\,|j\mu\rangle, \tag{17}$$

$$J_z|\,j\mu\rangle = \mu\,|j\mu\rangle \tag{18}$$

и фазы которых выбраны так, что эти векторы получаются один из другого посредством соотношений

$$J_+|\,j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu+1)}\,|j\mu+1\rangle, \tag{19}$$

$$J_-|\,j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu-1)}\,|j\mu-1\rangle. \tag{20}$$

В частности,

$$J_+|\,jj\rangle = J_-|\,j-j\rangle = 0. \tag{21}$$

Построенные $(2j+1)$ векторов образуют базис некоторого подпространства $\mathscr{E}^{(j)}$. Операторы J_+, J_-, J_z преобразуют эти векторы в себя и, следовательно, любой вектор пространства $\mathscr{E}^{(j)}$ — в вектор из $\mathscr{E}^{(j)}$. Другими словами, эти операторы оставляют $\mathscr{E}^{(j)}$ инвариантным. Произвольная функция $F(\boldsymbol{J})$ операторов J_+, J_-, J_z также оставляет $\mathscr{E}^{(j)}$ инвариантным. В разделе III мы увидим, что вращению квантовой системы как целого соответствует применение к вектору состояния оператора типа $F(\boldsymbol{J})$, следовательно, любые вращения всей системы оставляет $\mathscr{E}^{(j)}$ инвариантным.

§ 6. Стандартное представление $\{\boldsymbol{J}^2\ J_z\}$

Если $\boldsymbol{J}^2$ и J_z не образуют полного набора коммутирующих наблюдаемых, то для этих двух операторов существует много систем общих базисных векторов. Но даже в случае, когда они

образуют полный набор, фаза каждого базисного вектора может быть выбрана произвольной.

Среди представлений, в которых $\boldsymbol{J}^2$ и J_z диагональны, существуют такие, где оператор момента импульса действует особенно просто. Мы назовем их *стандартными представлениями* $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$. В этих представлениях базисные векторы, отвечающие определенному значению квантового числа j, могут быть сгруппированы в одну или несколько серий из $(2j+1)$ векторов, связанных соотношениями (19)—(20). Каждой серии отвечает подпространство $\mathscr{E}^{(j)}$, а все гильбертово пространство является прямой суммой этих подпространств.

Для построения стандартного представления можно поступать следующим образом. Среди собственных векторов $\boldsymbol{J}^2$, отвечающих собственному значению $j(j+1)$, рассмотрим те, которые являются собственными для J_z с собственным значением j. Такие векторы, в зависимости от обстоятельств, образуют в гильбертовом пространстве некоторое подпространство $\mathscr{F}^{(j)}$ размерности один, два, ... или бесконечномерное. В $\mathscr{F}^{(j)}$ всегда можно выбрать полный набор ортонормированных векторов $|\tau jj\rangle$. Индекс τ служит для того, чтобы отличать векторы с угловым моментом (jj) один от другого и может, в зависимости от обстоятельств, принимать одно, два, ... или бесконечное множество значений (дискретных или непрерывных; для определенности, будем предполагать их дискретными). По предположению,

$$\langle \tau jj | \tau' jj \rangle = \delta_{\tau\tau'}.$$

С каждым из этих векторов $|\tau jj\rangle$ можно связать $2j$ векторов, которые получаются последовательным действием оператора J_- согласно правилам предыдущего параграфа. Так строится $(2j+1)$-мерное подпространство $\mathscr{E}^{(j)}$; для того чтобы отличать эти подпространства друг от друга, будем обозначать их $\mathscr{E}(\tau j)$. Базисными векторами в $\mathscr{E}(\tau j)$ служат

$$|\tau jj\rangle, |\tau j\, j-1\rangle, \ldots, |\tau j\, -j\rangle.$$

Они ортонормированы и удовлетворяют основным соотношениям

$$\boldsymbol{J}^2 |\tau j\mu\rangle = j(j+1)|\tau j\mu\rangle, \tag{22}$$

$$J_z |\tau j\mu\rangle = \mu |\tau j\mu\rangle, \tag{23}$$

$$J_+ |\tau j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu+1)}\,|\tau j\,\mu+1\rangle, \tag{24}$$

$$J_- |\tau j\mu\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu(\mu-1)}\,|\tau j\,\mu-1\rangle. \tag{25}$$

Из (24) и (25) легко получить следующие важные соотношения (см. задачу 1):

$$|\tau j \pm \mu\rangle = \sqrt{\frac{(j+\mu)!}{(2j)!\,(j-\mu)!}}\, J_{\mp}^{j-\mu} |\tau j \pm j\rangle, \tag{26}$$

$$|\tau j \pm j\rangle = \sqrt{\frac{(j+\mu)!}{(2j)!\,(j-\mu)!}}\, J_{\pm}^{j-\mu} |\tau j \pm \mu\rangle. \tag{27}$$

Легко показать, что подпространства $\mathscr{E}(\tau j)$ с фиксированным j и различными τ взаимно ортогональны и их объединение образует подпространство $\mathscr{E}_j$, отвечающее собственному значению $j(j+1)$ оператора $\boldsymbol{J}^2$.

Базисные векторы $|\tau j\mu\rangle$ и $|\tau' j\mu'\rangle$ подпространств $\mathscr{E}(\tau j)$ и $\mathscr{E}(\tau' j)$ $(\tau \neq \tau')$ ортогональны, если $\mu \neq \mu'$, так как они отвечают различным собственным значениям J_z; то же справедливо и если $\mu = \mu'$, так как последовательное применение (24) дает

$$\langle \tau' j\mu\,|\,\tau j\mu\rangle = \langle \tau' j\mu+1\,|\,\tau j\mu+1\rangle = \ldots = \langle \tau' jj\,|\,\tau jj\rangle = \delta_{\tau\tau'}.$$

Чтобы показать, что любой собственный вектор $\boldsymbol{J}^2$, отвечающий собственному значению $j(j+1)$, является линейной комбинацией векторов $|\tau j\mu\rangle$ (τ и μ — переменные, j — фиксировано), достаточно показать, что любой вектор $|\omega j\mu\rangle$ с моментом $(j\mu)$ является линейной комбинацией базисных векторов $|\tau j\mu\rangle$ с тем же моментом импульса. Если $\mu = j$, то это следует из первоначального предположения. Если же $\mu \neq j$, то задачу можно свести к предыдущему случаю действия оператором $J_{-}^{j-\mu}$ на вектор $|\omega j\mu\rangle$ и используя соотношения (26) и (27).

Итак, исходя из полного набора ортонормированных векторов с моментом импульса (jj), мы построили базисные векторы стандартного представления $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ в подпространстве $\mathscr{E}_j$, отвечающем собственному значению $j(j+1)$ оператора $\boldsymbol{J}^2$. Повторяя эту процедуру для всех допустимых собственных значений $\boldsymbol{J}^2$, получаем стандартный базис во всем гильбертовом пространстве.

Отметим особенно простую форму матриц, задающих компоненты оператора $\boldsymbol{J}$ в таком представлении (см. задачу 2). Из равенств (23), (24) и (25) имеем

$$\langle \tau j\mu\,|\,J_z\,|\,\tau' j'\mu'\rangle = \mu\delta_{\tau\tau'}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'},$$

$$\langle \tau j\mu\,|\,J_{\pm}\,|\,\tau' j'\mu'\rangle = \sqrt{j(j+1)-\mu\mu'}\;\delta_{\tau\tau'}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'\pm 1}. \tag{28}$$

§ 7. Заключение

Приведенное выше исследование свойств оператора момента импульса основывалось исключительно на коммутационных соотношениях и на том факте, что его компоненты являются

эрмитовыми операторами в гильбертовом пространстве. Мы показали, что квантовое число j может принимать только целые или полуцелые значения и что каждому собственному значению $j(j+1)$ оператора отвечает одна или несколько серий из $(2j+1)$ линейно независимых векторов. В каждой серии векторы получаются один из другого применением операторов J_- или J_+ и соответствуют $(2j+1)$ возможным значениям квантового числа m

$$-j,\ -j+1,\ \ldots,\ +j.$$

Однако этих гипотез недостаточно для полного решения проблемы собственных значений. Следует еще определить:

(i) какие целые и полуцелые значения действительно составляют спектр j;

(ii) сколько серий из $(2j+1)$ линейно независимых векторов отвечают каждому из этих значений j.

Ответ на эти вопросы зависит от рассматриваемой задачи. Только из коммутационных соотношений нельзя, например, заранее исключить случай, когда j принимает одно значение (целое или полуцелое) и существует только один набор $(2j+1)$ линейно независимых векторов, отвечающих этому значению; пространство векторов состояний в этом случае $(2j+1)$-мерно. Такая ситуация встретится в разделе IV при рассмотрении спина.

Другой важный частный случай связан с моментом импульса $\boldsymbol{l}$ частицы, определяемым уравнением (1). В разделе II, где этот случай разбирается подробно, мы увидим, что спектр значений j составляют все целые числа от 0 до $+\infty$, а полуцелые значения отсутствуют [1]).

Раздел II. ОРБИТАЛЬНЫЙ МОМЕНТ ИМПУЛЬСА И СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

§ 8. Спектр операторов l^2 и l_z

Вернемся к квантовой системе одной частицы, с которой мы начали рассмотрение в § 2. Выбирая ось z в качестве полярного направления, мы можем выразить оператор l^2 и компоненты

[1]) В задаче 15 рассматривается случай, в котором J^2 и J_z образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых (одна серия из $(2j+1)$ векторов для каждого значения j) и в котором j может принимать все целые и полуцелые значения. Из-за присутствия в спектре как целых, так и полуцелых значений при рассмотрении $\boldsymbol{J}$ как оператора момента необходимо сделать некоторые замечания о физическом смысле наблюдаемых этой системы (см. § 15).

оператора $\boldsymbol{l}$ как функции полярных углов θ, φ и их производных (см. уравнения (Б. 82)—(Б. 84)*)). В дальнейшем изложении радиальную переменную можно опустить. Мы намереваемся построить функции $F_l^m(\theta, \varphi)$, удовлетворяющие двум уравнениям на собственные значения:

$$\boldsymbol{l}^2 F_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1) F_l^m(\theta, \varphi), \tag{29}$$

$$l_z F_l^m(\theta, \varphi) = m F_l^m(\theta, \varphi). \tag{30}$$

Так как волновая функция является однозначной функцией $\boldsymbol{r}$, то $F_l^m(\theta, \varphi)$ не должна меняться при замене φ на $\varphi + 2\pi$ [1]). Уравнение (30) уже исследовалось в § V. 12. Так как $l_z = -i\,\partial/\partial\varphi$, то $F_l^m(\theta, \varphi)$ имеет вид $f_l^m(\theta)\,e^{im\varphi}$, где m — целое. Коль скоро m — целое, должно быть целым и l, следовательно, *не существует полуцелого орбитального углового момента.*

Для того чтобы среди целых чисел ($\geqslant 0$) найти те, которые являются собственными значениями $\boldsymbol{l}$, и определить их вырождение, построим собственные функции $F_l^l(\theta, \varphi)$, отвечающие угловому моменту (l, l). Такая функция определяется уравнениями

$$l_z F_l^l(\theta, \varphi) = l F_l^l(\theta, \varphi), \tag{31}$$

$$l_+ F_l^l(\theta, \varphi) = 0. \tag{32}$$

Они эквивалентны системе уравнений (29)—(30) при $m = l$, так как в силу тождества (9а)

$$\boldsymbol{l}^2 = l_z(l_z + 1) + l_- l_+.$$

Из (32) вместе с (31) следует (29) и обратно. Система уравнений в частных производных первого порядка (31)—(32) легко решается, коль скоро даны дифференциальные операторы l_z и l_+ (ур. (Б. 82)—(Б. 83)). Из уравнения (31) имеем

$$F_l^l(\theta, \varphi) = f_l(\theta)\,e^{il\varphi}.$$

Подставляя это выражение в уравнение (32), получаем дифференциальное уравнение

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l\operatorname{ctg}\theta\right) f_l(\theta) = 0,$$

решение которого с точностью до произвольного множителя есть $\sin^l\theta$. Каждому целому числу l ($\geqslant 0$) отвечает одна и только

*) Здесь и далее даны ссылки на формулы, приведенные в Дополнениях А, Б, В, Г томов 1 и 2. (*Прим. ред.*)

[1]) Кроме того, $F_l^m(0, \varphi)$ и $F_l^m(\pi, \varphi)$ не зависят от φ, что автоматически выполняется для полученных ниже решений.

одна собственная функция (определенная с точностью до множителя), соответствующая угловому моменту (l, l)

$$\sin^l\theta e^{il\varphi}.$$

Следовательно, спектр оператора l^2 состоит из последовательности чисел $l(l+1)$, где l *принимает все целые значения от* 0 *до* $+\infty$. Каждому собственному значению $l(l+1)$ соответствует $(2l+1)$ собственных значений m оператора l_z — $(2l+1)$ целых чисел в интервале $(-l, +l)$. Каждой паре (lm) соответствует *одно и только одно собственное состояние* (если мы ограничимся только функциями от θ и φ): спектр операторов l^2 и l_z в целом невырожден.

§ 9. Определение и построение сферических функций

Общая собственная функция l^2 и l_z, отвечающая собственным значениям (lm), определена с точностью до постоянного множителя. Произвол исчезает, если нормировать ее на единицу и выбрать подходящее условие для фазы. Таким образом, получаем сферическую функцию порядка (lm), которую будем обозначать $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

Функции $Y_l^m(\theta, \varphi)$ образуют *ортонормированную систему* функций от θ и φ с элементом объема $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ в интеграле для скалярного произведения. Примем без доказательства утверждение о *полноте* этой системы.

Фиксируем фазы следующим образом [1]). Потребуем прежде всего, чтобы Y_l^m образовывали стандартный базис. Для этого достаточно, чтобы они удовлетворяли уравнениям (24)—(25), записанным в представлении $\{\theta\varphi\}$ (ур. (Б. 89)). Тем самым определены относительные фазы $(2l+1)$ сферических функций, отвечающих данному значению l, и остается только фиксировать фазу одной из них, например $Y_l^0(\theta, \varphi)$. Потребуем, чтобы величина $Y_l^0(0, 0)$ была вещественным и положительным числом.

Если обозначить через $|lm\rangle$ векторы, которым в представлении $\{\theta\varphi\}$ отвечают сферические функции $Y_l^m(\theta, \varphi)$, то они удовлетворяют уравнениям (24)—(25) и, следовательно, (ур. (26))

$$|lm\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\, l_-^{l-m}|ll\rangle = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!\,(l+m)!}}\, l_+^{l+m}|l\ -l\rangle.$$

[1]) Такая нормировка используется большинством авторов. Однако в обсуждениях, использующих инвариантность относительно обращения времени, при рассмотрении волновых функций в конфигурационном пространстве предпочтительнее функции $\mathcal{Y}_l^m(\theta, \varphi) \equiv i^l Y_l^m(\theta, \varphi)$ (см. § XV. 22).

Другими словами,

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\, l_-^{l-m} Y_l^l(\theta, \varphi), \tag{33}$$

или

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!\,(l+m)!}}\, l_+^{l+m} Y_l^{-l}(\theta, \varphi). \tag{34}$$

Явные выражения для дифференциальных операторов l_- и l_+ приведены в приложении (ур. (Б. 83)). Используя их, получаем

$$l_\pm e^{i\mu\varphi} f(\theta) = \mp e^{i(\mu \pm 1)\varphi} \left(\sin^{1 \pm \mu}\theta \frac{d}{d(\cos\theta)} \sin^{\mp\mu}\theta\right) f(\theta).$$

При любой $f(\theta)$ выражение в скобках следует рассматривать как оператор, действующий на функцию $f(\theta)$, стоящую справа от него. Следовательно, последовательное применение l_+ или l_- к функции $e^{i\mu\varphi} f(\theta)$ дает (μ и s целые)

$$l_\pm^s e^{i\mu\varphi} f(\theta) = (\mp)^s e^{i(\mu \pm s)\varphi} \left(\sin^{s \pm \mu}\theta \frac{d^s}{d(\cos\theta)^s} \sin^{\mp\mu}\theta\right) f(\theta). \tag{35}$$

Из рассуждений, приведенных в § 8, нам известно, что

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = c_l \sin^l\theta e^{il\varphi},$$

где c_l — константа, модуль которой определяется условием нормировки Y_l^l, откуда

$$|c_l| = (4\pi)^{-\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{(2l+1)!}}{2^l l!}, \tag{36}$$

а фазу следует определить согласно принятому выше условию.

Подставляя выражение Y_l^l в уравнение (33) и принимая во внимание тождество (35), получаем

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = c_l \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\, e^{im\varphi} \sin^{-m}\theta \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} \sin^{2l}\theta. \tag{37}$$

При $m = -l$ отсюда имеем

$$Y_l^{-l}(\theta, \varphi) = (-)^l c_l e^{-il\varphi} \sin^l\theta. \tag{38}$$

Подставляя это выражение в уравнение (34) и вновь используя тождество (35), получаем новое эквивалентное предыдущему выражение для Y_l^m

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-)^m c_l \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!\,(l+m)!}}\, e^{im\varphi} \sin^m\theta \frac{d^{l+m}}{d(\cos\theta)^{l+m}} \sin^{2l}\theta. \tag{39}$$

При $m=0$ эти выражения совпадают

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = c_l \sqrt{\frac{1}{(2l)!}} \frac{d^l}{d(\cos\theta)^l} (1-\cos^2\theta)^l.$$

С точностью до множителя получили полином Лежандра $P_l(\cos\theta)$ (ур. (В. 71))

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = (-1)^l \frac{c_l 2^l l!}{\sqrt{(2l)!}} P_l(\cos\theta) = (-1)^l \frac{c_l}{|c_l|} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta).$$

Условие вещественности и положительности $Y_l^0(0, 0)$ определяет выбор фазы

$$\frac{c_l}{|c_l|} = (-1)^l.$$

Тем самым полностью определены выражения (37) и (39) для $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

Большинство свойств сферических функций, которые перечислены в Дополнении Б, можно легко получить из компактных формул (37) и (39). Отметим, в частности, что

$$Y_l^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_l^{m*}(\theta, \varphi),$$

Y_l^m является произведением $e^{im\varphi} \sin^{|m|}\theta$ и полинома по $\cos\theta$ степени $l-|m|$ и четности $(-1)^{l-|m|}$, а *четность* Y_l^m (задача 4) равна $(-1)^l$, т. е.

$$Y_l^m(\pi-\theta, \varphi+\pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Раздел III. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА И ВРАЩЕНИЯ

§ 10. Определение вращений. Углы Эйлера

В этом параграфе мы напомним некоторые свойства вращений в обычном пространстве.

По определению, вращением вокруг точки O называется такое перемещение точек пространства как целого, при котором точка O остается неподвижной. При таком перемещении, каждая точка P переходит в новое положение P' и существует взаимнооднозначное соответствие между P и P'. Можно было бы определить вращение вокруг O как взаимнооднозначное соответствие между точками пространства, при котором точке O соответствует она сама и которое сохраняет как расстояния

(а следовательно, и углы), так и ориентацию координатных осей [1]).

Единичный вектор $\boldsymbol{u}$ и угол φ определяют конкретное вращение $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ — поворот на угол φ вокруг оси, направленной по $\boldsymbol{u}$ (положительное вращение вокруг этой оси определяется обычным образом). Этот способ задания вращения не единственный. Для выполнения $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi) = \mathcal{R}_{\boldsymbol{u}_1}(\varphi)$, необходимо и достаточно, чтобы

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}_1 &= \boldsymbol{u} \\ \varphi_1 &= \varphi + 2n\pi \end{aligned} \qquad \text{или} \qquad \begin{aligned} \boldsymbol{u}_1 &= -\boldsymbol{u} \\ \varphi_1 &= -\varphi + 2n\pi \end{aligned}$$

(n — произвольное целое число).

Будем называть вращение *инфинитезимальным*, если $\varphi = \varepsilon$ бесконечно мало. Легко написать вектор $\boldsymbol{V}'$, в который при инфинитезимальном вращении $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ переходит вектор $\boldsymbol{V}$:

$$\boldsymbol{V}' \approx \boldsymbol{V} + \varepsilon(\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{V}) \qquad (\varepsilon \ll 1). \qquad (40)$$

Другой способ задания вращения состоит в фиксации углов Эйлера α, β, γ. Пусть $Oxyz$ — правая система осей, а $OXYZ$ — система осей, получаемая из предыдущей вращением, Ou — одна из двух ориентированных осей, перпендикулярных плоскости OzZ (рис. 1). Углами Эйлера будут [2])

$$\alpha = (Oy, Ou), \quad \beta = (Oz, OZ), \quad \gamma = (Ou, OY).$$

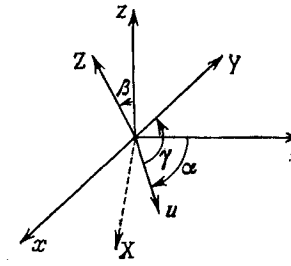


Рис. 1. Определение углов Эйлера.

Полное вращение является результатом трех последовательных вращений

$\mathcal{R}_z(\alpha)$ — вращение на угол α вокруг Oz (Oy переходит в Ou);

$\mathcal{R}_u(\beta)$ — вращение на угол β вокруг Ou (Oz переходит в OZ);

$\mathcal{R}_Z(\gamma)$ — вращение на угол γ вокруг OZ (Ou переходит в OY).

Обозначим результирующее вращение через $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ и запишем

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}_Z(\gamma)\,\mathcal{R}_u(\beta)\,\mathcal{R}_z(\alpha). \qquad (41)$$

Углы α, β, γ являются алгебраическими величинами. Они положительны или отрицательны в зависимости от того, является ли вращение вокруг осей Oz, Ou, OZ положительным

[1]) В отличие от отражений, которые сохраняют расстояния, но меняют ориентацию координатных осей.

[2]) Принятое здесь определение несколько отличается от используемого обычно в теории гироскопа.

или отрицательным. Для выбранной системы $Oxyz$ одно и то же вращение может быть задано несколькими наборами углов Эйлера. Необходимыми и достаточными условиями равенства $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}(\alpha_1\beta_1\gamma_1)$ являются

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \alpha + 2\pi n_\alpha & \qquad \alpha_1 &= \alpha + \pi + 2\pi n_\alpha \\ \beta_1 &= \beta + 2\pi n_\beta \quad \text{или} & \beta_1 &= -\beta + 2\pi n_\beta \\ \gamma_1 &= \gamma + 2\pi n_\gamma & \gamma_1 &= \gamma - \pi + 2\pi n_\gamma \end{aligned} \tag{42}$$

(n_α, n_β, n_γ произвольные целые числа).

С каждым вращением можно связать некоторую матрицу 3×3, определяемую следующим образом. Фиксируем правую декартову систему координатных осей $Oxyz$ с единичными векторами $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ в направлении осей Ox, Oy, Oz соответственно. При вращении они преобразуются в три новых вектора $\boldsymbol{A}_1$, $\boldsymbol{A}_2$, $\boldsymbol{A}_3$, образующих новую декартову систему $OXYZ$. Каждый из векторов $\boldsymbol{A}_j$ является линейной комбинацией векторов $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$[1])

$$\boldsymbol{A}_j \equiv \mathcal{R}[\boldsymbol{a}_j] = \boldsymbol{a}_i \mathcal{R}_{ij}, \quad \mathcal{R}_{ij} = (\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{A}_j).$$

Коэффициенты $\mathcal{R}_{ij}$ трех линейных комбинаций являются элементами матрицы 3×3, которую мы обозначим той же буквой $\mathcal{R}$, что и само вращение. Эта матрица полностью определяет вращение. Действительно, пусть $\boldsymbol{V} \equiv \boldsymbol{a}_j V_j$ — некоторый вектор в пространстве, определяемый его координатами (V_1, V_2, V_3) в системе $Oxyz$. При вращении он преобразуется в вектор

$$\boldsymbol{V}' \equiv \mathcal{R}[\boldsymbol{V}] = \boldsymbol{A}_j V_j = \boldsymbol{a}_i \mathcal{R}_{ij} V_j.$$

Компоненты $\boldsymbol{V}'$ в системе координат $Oxyz$ равны

$$V_i' = \mathcal{R}_{ij} V_j. \tag{43}$$

Так как векторы $\boldsymbol{A}_i$ образуют декартову систему, то вещественная матрица $\mathcal{R}$ ортогональна и унимодулярна

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}^*, \quad \tilde{\mathcal{R}} = \mathcal{R}^{-1}, \quad \det \mathcal{R} = 1.$$

Для фиксированной системы осей $Oxyz$ матрица, связанная с вращением, определена однозначно. Верно и обратное, каждой вещественной, ортогональной, унимодулярной матрице соответствует одно и только одно вращение.

В Дополнении В (формула (В. 45)) дано выражение элементов матрицы, соответствующей вращению $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$, через углы Эйлера. В качестве примера приведем закон преобразования

---

[1]) В этом разделе мы будем систематически пользоваться соглашением о суммировании по повторяющимся индексам, так:

$$\boldsymbol{a}_i \mathcal{R}_{ij} = \boldsymbol{a}_1 \mathcal{R}_{1j} + \boldsymbol{a}_2 \mathcal{R}_{2j} + \boldsymbol{a}_3 \mathcal{R}_{3j}.$$

координат рассмотренного выше вектора $\boldsymbol{V}$ при вращении $\mathcal{R}_z(\alpha)$ на угол α вокруг Oz

$$\begin{aligned} V_1' &= V_1 \cos\alpha - V_2 \sin\alpha, \\ V_2' &= V_1 \sin\alpha + V_2 \cos\alpha, \\ V_3' &= V_3. \end{aligned} \tag{44}$$

Произведение двух вращений $\mathcal{R}_1$ и $\mathcal{R}_2$, т. е. преобразование $\mathcal{R} \equiv \mathcal{R}_2\mathcal{R}_1$, которое получается последовательным выполнением вращений $\mathcal{R}_1$, а затем $\mathcal{R}_2$, также является вращением. Соотношение (41) дает пример такого произведения. Углы Эйлера для $\mathcal{R}$ трудно выразить в виде функций от углов Эйлера $\mathcal{R}_1$ и $\mathcal{R}_2$. В то же время, матрица, соответствующая $\mathcal{R}$, легко получается как произведение матриц $\mathcal{R}_1$ и $\mathcal{R}_2$

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_2\mathcal{R}_1.$$

§ 11. Вращение физической системы. Оператор вращения

При обсуждении свойств физической системы, связанных с вращениями, — все сказанное ниже справедливо для любого преобразования пространства — можно принять одну из двух точек зрения, которые следует четко различать. Согласно первой (иногда ее называют пассивной) производят вращение координатных осей, оставляя фиксированной каждую точку P пространства и связанные с ней физические величины. Согласно второй (иногда ее называют активной) фиксированными остаются оси координат, а вращают физическую систему. Обе точки зрения эквивалентны. Поворот координатных осей или поворот физической системы в противоположном направлении приводят к одному и тому же результату. Далее, если не оговорено противное, мы будем придерживаться второй точки зрения (будем вращать физическую систему).

Определение «вращения физической системы» в квантовой механике требует большей осторожности, чем в классической, так как связь между динамическими переменными и динамическими состояниями значительно сложнее. Рассмотрим для простоты вначале случай одной частицы. Обозначим a — возможное динамическое состояние частицы и $\psi(\boldsymbol{r})$ — соответствующую волновую функцию. Состояние, получаемое после вращения $\mathcal{R}$, обозначим a' и соответствующую a' волновую функцию — $\psi'(\boldsymbol{r})$

$$a' \equiv \mathcal{R}[a], \quad \psi(\boldsymbol{r}) \equiv \mathcal{R}[\psi(\boldsymbol{r})].$$

Когда мы говорим, что состояние a переходит при вращении $\mathcal{R}$ в состояние a', мы имеем в виду, что результаты любых наблюдений над системой в состоянии a' могут быть получены посредством вращения $\mathcal{R}$ из результатов, которые дали бы те же

наблюдения, выполненные над системой в состоянии a. Рассмотрим, например, измерение координаты. Распределение вероятности для состояний a и a' равно $|\psi(r)|^2$ и $|\psi'(r)|^2$ соответственно. Согласно приведенному выше утверждению последнее получается из первого при вращении $\mathcal{R}$, т. е. *значение второй функции в данной точке r равно значению первой функции в точке r_1, которая переходит в r при вращении $\mathcal{R}$*

$$|\psi'(r)|^2 = |\psi(r_1)|^2, \quad r_1 = \mathcal{R}^{-1}r. \tag{45}$$

Аналогично, если $\varphi(p)$ и $\varphi'(p)$ — волновые функции в импульсном пространстве, отвечающие ψ и ψ', то имеем

$$|\varphi'(p)|^2 = |\varphi(p_1)|^2, \quad p_1 = \mathcal{R}^{-1}p. \tag{46}$$

Ясно, что для того чтобы выполнялись все эти условия, достаточно равенства значений функции ψ' в точке r и функции ψ в точке r_1, т. е.

$$\psi'(r) \equiv \mathcal{R}[\psi(r)] = \psi(\mathcal{R}^{-1}r). \tag{47}$$

Можно показать, что это равенство является и необходимым условием [1]). Следовательно, волновая функция определена однозначно.

Соотношение (47) устанавливает взаимно однозначное соответствие между ψ и ψ'. Ясно, что это соответствие — линейное, т. е. существует оператор R такой, что

$$\psi' = R\psi.$$

Оператор R — унитарный, так как нормы ψ и ψ' равны,

$$\int |\psi'(r)|^2 dr = \int |\psi(\mathcal{R}^{-1}r)|^2 dr = \int |\psi(r_1)|^2 dr_1$$

(последний интеграл получается заменой переменной $r_1 = \mathcal{R}^{-1}r$ с учетом того факта, что при вращении сохраняется элемент объема dr).

Все эти рассуждения без труда обобщаются на систему N частиц; при вращении $\mathcal{R}$ волновая функция $\psi(r^{(1)}, r^{(2)}, \ldots, r^{(N)})$ переходит в

$$\mathcal{R}[\psi(r^{(1)}, \ldots, r^{(N)})] = \psi(\mathcal{R}^{-1}r^{(1)}, \ldots, \mathcal{R}^{-1}r^{(N)}) = R\psi(r^{(1)}, \ldots, r^{(N)}). \tag{48}$$

Как и выше, оператор вращения R — линейный и унитарный.

[1]) Общее доказательство будет дано в § XV.6. В действительности функция ψ' определяется этими условиями только с точностью до фазового множителя. Этот произвол исчезает, если потребовать, чтобы определенные далее операторы R образовывали группу, изоморфную группе вращений; именно так мы и поступаем.

В общем случае, с каждым вращением $\mathscr{R}$ физической системы связан унитарный оператор R; действие R на вектор $|a\rangle$, представляющий динамическое состояние системы до вращения, дает вектор $|a'\rangle$, представляющий ее динамическое состояние после вращения,

$$RR^{+} = R^{+}R = 1, \tag{49}$$

$$|a'\rangle = R|a\rangle. \tag{50}$$

Используя закон преобразования (50) и определение оператора плотности, легко получить закон его преобразования. Пусть ρ — оператор плотности, представляющий некоторое (чистое или смешанное) состояние системы, а ρ' — оператор плотности, представляющий состояние, получившееся в результате вращения $\mathscr{R}$. Тогда имеем

$$\rho' \equiv \mathscr{R}[\rho] = R\rho R^{+}. \tag{51}$$

§ 12. Вращение наблюдаемых

Кроме вращения исследуемой системы, можно вращать также приборы, с помощью которых производятся наблюдения над ней. Выше мы определили закон преобразования векторов состояния, определим теперь закон преобразования наблюдаемых, представляющих различные измерительные операции, которые можно выполнить над системой.

Пусть Q — наблюдаемая, а $Q' = \mathscr{R}[Q]$ — ее преобразование при вращении $\mathscr{R}$.

По физическому смыслу с наблюдаемой Q связана некоторая операция измерения, и преобразование Q в Q' соответствует вращению измеряющего прибора. Следовательно, среднее значение при измерении Q для системы в состоянии $|a\rangle$ равно среднему значению при измерении Q' для системы в состоянии $|a'\rangle = \mathscr{R}[|a\rangle]$, т. е.

$$\langle a|Q|a\rangle = \langle a'|Q'|a'\rangle.$$

Так как $|a'\rangle = \mathscr{R}|a\rangle$, предыдущее равенство можно переписать в виде

$$\langle a|Q|a\rangle = \langle a|R^{+}Q'R|a\rangle.$$

Из того, что оно справедливо для любого $|a\rangle$, имеем (ср. § VII. 5)

$$Q = R^{+}Q'R,$$

или

$$Q' = RQR^{+}. \tag{52}$$

Другими словами, при вращении $\mathscr{R}$ наблюдаемые преобразуются под действием того же унитарного оператора, что и векторы состояний.

В частности, если наблюдаемая S является скалярной величиной, т. е. инвариантна относительно вращений [1]), то для любого R

$$S' \equiv RSR^{+} = S.$$

Поскольку оператор R — унитарный, это равенство можно переписать так:

$$[R, S] = 0. \tag{53}$$

Следовательно, инвариантная относительно вращений наблюдаемая коммутирует со всеми операторами вращений.

Другой интересный случай представляют векторные операторы. Будем использовать обозначения § 10 и дополнительно буквой $\boldsymbol{K}$ обозначим векторный оператор с компонентами $K_i = (\boldsymbol{K}\boldsymbol{a}_i)$. Если подействовать вращением $\mathscr{R}$ на оператор K_1 — компоненту $\boldsymbol{K}$ по оси Ox, то получим оператор K_1' — компоненту $\boldsymbol{K}$ по оси OX. В общем случае $\mathscr{R}[\boldsymbol{K}\boldsymbol{a}] = \boldsymbol{K}\boldsymbol{a}'$, где $\boldsymbol{a}' = \mathscr{R}[\boldsymbol{a}]$; итак

$$K_i' \equiv \mathscr{R}[K_i] = \boldsymbol{K}\boldsymbol{A}_i = K_j \mathscr{R}_{ji}.$$

Получили закон преобразования декартовых компонент векторного оператора $\boldsymbol{K}$

$$K_i' \equiv RK_iR^{+} = \tilde{\mathscr{R}}_{ij} K_j. \tag{54}$$

Отметим, что в отличие от закона (43) здесь фигурирует матрица $\tilde{\mathscr{R}}$ — обратная матрице $\mathscr{R}$: компоненты $\boldsymbol{K}$ преобразуются при вращении $\mathscr{R}$ так же, как компоненты вектора при вращении $\mathscr{R}^{-1}$.

§ 13. Момент импульса и инфинитезимальные вращения

Теперь мы можем установить фундаментальную связь между моментом импульса системы и операторами бесконечно малых (инфинитезимальных) вращений.

Как и в § 11, рассмотрим вначале случай одной частицы. Согласно (47) вращение $\mathscr{R}_z(\alpha)$ на угол α вокруг оси Oz переводит функцию $\psi(x, y, z)$ (см. ур. (44)) в

$$\mathscr{R}_z(\alpha)[\psi(x, y, z)] = \psi(x\cos\alpha + y\sin\alpha, -x\sin\alpha + y\cos\alpha, z).$$

---

[1]) Такое определение скаляра будет использовано в настоящей главе. В дальнейшем величины, инвариантные относительно вращений, будут разделены на скаляры и псевдоскаляры. При отражениях первые не изменяются, а вторые умножаются на -1.

В результате бесконечно малого вращения $\mathcal{R}_z(\varepsilon)$, оставляя в правой части только члены первого порядка по ε тейлоровского разложения в точке (x, y, z), получаем

$$\begin{aligned} R_z(\varepsilon)[\psi(x, y, z)] &\approx \psi(x + y\varepsilon, -x\varepsilon + y, z) \\ &\approx \psi(x, y, z) + \varepsilon\left(y\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) \\ &\approx (1 - i\varepsilon l_z)\psi(x, y, z). \end{aligned}$$

Последнее равенство следует из определения дифференциального оператора l_z ($\hbar = 1$). Следовательно, оператор инфинитезимального вращения имеет вид

$$R_z(\varepsilon) \approx 1 - i\varepsilon l_z.$$

Для инфинитезимального вращения вокруг вектора $\boldsymbol{u}$, используя аналогичные рассуждения, имеем

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \approx 1 - i\varepsilon(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{u}).$$

Тот же результат получается для системы N частиц. Для этого достаточно, исходя из (48), проделать те же преобразования, что и в случае одной частицы (47)

$$R_z(\varepsilon) \approx 1 - i\varepsilon L_z,$$

или в более общем виде

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \approx 1 - i\varepsilon(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{u}),$$

где $\boldsymbol{L}$ — полный момент импульса системы.

Итак, справедливо утверждение.

Если $\boldsymbol{J}$ — полный момент импульса системы, то его компонента по произвольной оси $\boldsymbol{u}$ связана с оператором инфинитезимального вращения вокруг этой оси соотношением

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \approx 1 - i\varepsilon(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u}). \tag{55}$$

В случае, когда система не имеет классического аналога, это фундаментальное соотношение служит определением момента импульса.

Для согласованности этого определения нужна уверенность в том, что оператор $(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ является компонентой некоторого векторного оператора $\boldsymbol{J}$ по направлению $\boldsymbol{u}$. Для этого достаточно [1]), чтобы каждому инфинитезимальному вращению $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ соответствовал один и только один оператор инфинитезимального вращения $R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$. Согласно закону преобразования векторов (40)

[1]) Это равносильно предположению, что операторы вращений образуют группу.

операция $\mathcal{R}_u(\varepsilon)$ эквивалентна, в первом порядке по ε, произведению операций $\mathcal{R}_x(\varepsilon u_x)\mathcal{R}_y(\varepsilon u_y)\mathcal{R}_z(\varepsilon u_z)$, что дает

$$R_u(\varepsilon) \approx R_x(\varepsilon u_x) R_y(\varepsilon u_y) R_z(\varepsilon u_z) \approx 1 - i\varepsilon (u_x J_x + u_y J_y + u_z J_z).$$

Из этого определения следует, что любой скалярный оператор S коммутирует с компонентами $\boldsymbol{J}$ (ур. (53))

$$[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}),\ S] = 0. \tag{56}$$

Из соотношения (55) получаются также правила коммутации компонент $\boldsymbol{J}$ с компонентами произвольного векторного оператора $\boldsymbol{K}$. Пусть $K_a \equiv \boldsymbol{K}\boldsymbol{a}$ — компонента $\boldsymbol{K}$ по направлению вектора $\boldsymbol{a}$. По определению, ее преобразование при вращении $\mathcal{R}_u(\varepsilon)$ равно

$$K'_a \equiv R_u(\varepsilon) K_a R_u^{\dagger}(\varepsilon) \approx K_a - i\varepsilon [J_u,\ K_a].$$

Кроме того, согласно закону преобразования вектора $\boldsymbol{a}$ (ур. (40)), имеем

$$K'_a = \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}' \approx \boldsymbol{K}[\boldsymbol{a} + \varepsilon(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a})].$$

Приравнивая в этих выражениях члены первого порядка по ε, получаем

$$[J_u,\ K_a] = i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a}),$$

или иначе

$$[(\boldsymbol{u}\boldsymbol{J}),\ (\boldsymbol{a}\boldsymbol{K})] = i((\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{K}). \tag{57}$$

Подставляя вместо $\boldsymbol{K}$ оператор $\boldsymbol{J}$, снова получаем коммутационные соотношения, характеризующие момент импульса (ур. (4)).

Следующее определение *полного* момента импульса эквивалентно данному ранее:

Если фундаментальными наблюдаемыми системы являются скалярные операторы S_1, S_2, ... и компоненты векторных операторов $\boldsymbol{K}_1$, $\boldsymbol{K}_2$, ..., то, по определению, *полный* момент импульса системы — это *векторный оператор* $\boldsymbol{J}$, компоненты которого коммутируют со всеми S и удовлетворяют коммутационным соотношениям (57) с компонентами операторов $\boldsymbol{K}$.

Если соотношения (57) выполняются не для всех векторных операторов $\boldsymbol{K}_1$, $\boldsymbol{K}_2$, ..., то $\boldsymbol{J}$ не является полным моментом импульса системы, даже если выполняются коммутационные соотношения (4). Так, для рассмотренного в § 11 случая N частиц любой векторный оператор, являющийся суммой некоторого числа моментов $\boldsymbol{l}^{(i)}$ отдельных частиц, будет удовлетворять соотношениям (4), но только сумма $\boldsymbol{L}$ всех $\boldsymbol{l}^{(i)}$ равна полному моменту импульса.

§ 14. Построение оператора R $(\alpha\beta\gamma)$

Произвольное конечное вращение можно рассматривать как последовательность инфинитезимальных вращений. Соответствующий оператор будет произведением операторов инфинитезимальных вращений, и так как последние являются функциями полного момента (ур. (55)), то и оператор произвольного конечного вращения тоже будет функцией полного момента импульса.

Вращение $\mathscr{R}_u(\varphi)$ является последовательностью инфинитезимальных вращений вокруг оси u. В частности,

$$\mathscr{R}_u(\varphi + d\varphi) = \mathscr{R}_u(d\varphi)\,\mathscr{R}_u(\varphi).$$

Полагая $J_u \equiv (\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ и используя формулу (55), получаем

$$R_u(\varphi + d\varphi) = R_u(d\varphi)\,R_u(\varphi) = (1 - iJ_u\,d\varphi)\,R_u(\varphi),$$

или иначе

$$\frac{d}{d\varphi}R_u(\varphi) = -iJ_uR_u(\varphi) \qquad (R_u(0) = 1).$$

Это дифференциальное уравнение легко интегрируется и дает

$$R_u(\varphi) = e^{-i\varphi J_u}. \tag{58}$$

Рассмотрим теперь вращение $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$, определяемое углами Эйлера (α, β, γ). Как показано в § 10, $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ можно рассматривать как последовательность вращений на углы α, β, γ вокруг осей Oz, Ou, OZ соответственно (см. рис. 1). Следовательно, имеем

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_Z(\gamma)\,R_u(\beta)\,R_z(\alpha).$$

Используя (58), три вращения в правой части можно выразить через компоненты J_z, J_u и J_z момента импульса

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_Z}e^{-i\beta J_u}e^{-i\alpha J_z}. \tag{59}$$

Обратим внимание на порядок экспонент в правой части.

Преобразуем выражение (59) к виду, в котором фигурируют только компоненты момента импульса вдоль координатных осей. Вращение $\mathscr{R}_z(\alpha)$ переводит оператор J_y в оператор J_u, что в силу закона преобразования операторов (52) дает

$$J_u = R_z(\alpha)\,J_yR_z^{\dagger}(\alpha) = e^{-i\alpha J_z}J_ye^{+i\alpha J_z}.$$

Итак,

$$e^{-i\beta J_u} = e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{+i\alpha J_z}.$$

Подставляя это выражение в правую часть (59), получаем

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_Z}e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}.$$

§ 14. Построение оператора R $(\alpha\beta\gamma)$

Произвольное конечное вращение можно рассматривать как последовательность инфинитезимальных вращений. Соответствующий оператор будет произведением операторов инфинитезимальных вращений, и так как последние являются функциями полного момента (ур. (55)), то и оператор произвольного конечного вращения тоже будет функцией полного момента импульса.

Вращение $\mathcal{R}_u(\varphi)$ является последовательностью инфинитезимальных вращений вокруг оси u. В частности,

$$\mathcal{R}_u(\varphi + d\varphi) = \mathcal{R}_u(d\varphi)\,\mathcal{R}_u(\varphi).$$

Полагая $J_u \equiv (\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ и используя формулу (55), получаем

$$R_u(\varphi + d\varphi) = R_u(d\varphi)\,R_u(\varphi) = (1 - iJ_u\,d\varphi)\,R_u(\varphi),$$

или иначе

$$\frac{d}{d\varphi}R_u(\varphi) = -iJ_uR_u(\varphi) \qquad (R_u(0) = 1).$$

Это дифференциальное уравнение легко интегрируется и дает

$$R_u(\varphi) = \mathrm{e}^{-i\varphi J_u}. \tag{58}$$

Рассмотрим теперь вращение $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$, определяемое углами Эйлера (α, β, γ). Как показано в § 10, $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ можно рассматривать как последовательность вращений на углы α, β, γ вокруг осей Oz, Ou, OZ соответственно (см. рис. 1). Следовательно, имеем

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_Z(\gamma)\,R_u(\beta)\,R_z(\alpha).$$

Используя (58), три вращения в правой части можно выразить через компоненты J_Z, J_u и J_z момента импульса

$$R(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{-i\gamma J_Z}\mathrm{e}^{-i\beta J_u}\mathrm{e}^{-i\alpha J_z}. \tag{59}$$

Обратим внимание на порядок экспонент в правой части.

Преобразуем выражение (59) к виду, в котором фигурируют только компоненты момента импульса вдоль координатных осей. Вращение $\mathcal{R}_z(\alpha)$ переводит оператор J_y в оператор J_u, что в силу закона преобразования операторов (52) дает

$$J_u = R_z(\alpha)\,J_yR_z^{\dagger}(\alpha) = \mathrm{e}^{-i\alpha J_z}J_y\mathrm{e}^{+i\alpha J_z}.$$

Итак,

$$\mathrm{e}^{-i\beta J_u} = \mathrm{e}^{-i\alpha J_z}\mathrm{e}^{-i\beta J_y}\mathrm{e}^{+i\alpha J_z}.$$

Подставляя это выражение в правую часть (59), получаем

$$R(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{-i\gamma J_Z}\mathrm{e}^{-i\alpha J_z}\mathrm{e}^{-i\beta J_y}.$$

Тем не менее можно показать (доказательство мы опускаем), что каждому конечному вращению соответствует самое большее два оператора R' и R'', отличающиеся «вращением на 2π»,

$$R'' = DR'. \tag{62}$$

В рассматриваемых до сих пор физических системах момент импульса мог принимать только целочисленные значения, в этом случае $D = 1$ и $R' = R''$, так что каждому вращению $\mathcal{R}$ соответствует один и только один оператор вращения. Если же система имеет состояния с полуцелым угловым моментом, то операторы R' и R'' не совпадают.

Обсудим факт существования двух различных операторов, описывающих одно и то же вращение. То, что вращение на 2π кет-вектора не дает в результате тот же вектор, не ведет к принципиальным трудностям, если только это не приводит к наблюдаемому эффекту. Ясно, что результаты эксперимента не изменятся, если заранее повернуть некоторые из приборов наблюдения на угол 2π; два тождественных прибора, занимая одно и то же положение, дадут один и тот же результат. Следовательно, если наблюдаемая Q представляет измеримую величину, то она должна быть инвариантна при вращении на 2π; говоря более общим образом, если выполняется вращение $\mathcal{R}$ над Q, то полученная в результате наблюдаемая не должна зависеть от конкретного выбора способа вращения

$$R'QR'^{\dagger} = R''QR''^{\dagger}.$$

Инвариантность относительно «вращения на 2π» гарантирует выполнение этого более общего свойства. Формально ее можно записать как

$$[D, Q] = 0. \tag{63}$$

По определению, наблюдаемая является эрмитовым оператором, имеющим полный набор собственных векторов. Каждый оператор, представляющий физическую величину, должен быть наблюдаемой — необходимое условие самосогласованности квантовой механики. Однако совсем не обязательно, чтобы было верно обратное. Будем называть *физической наблюдаемой* наблюдаемую, связанную с физически измеряемой величиной. Предшествующий анализ показал, что любая физическая наблюдаемая должна удовлетворять [1]) соотношению (63). При

[1]) Все наблюдаемые физических систем, которые рассматриваются в этой книге, удовлетворяют соотношению (63). Таким образом, между наблюдаемыми и физическими наблюдаемыми имеется лишь чисто академическое различие. Однако можно представить себе физические системы, для которых не все наблюдаемые удовлетворяют соотношению (63); пример такой системы имеется в задаче 15.

изучении физической системы обычно неявно предполагают, что все наблюдаемые системы являются физическими наблюдаемыми; хотя такое предположение часто упрощает обсуждение, оно несущественно и может быть заменено на более ограничительное, без серьезных модификаций в интерпретации теории. Соотношение (63) представляет одно из таких ограничений; с другими мы встретимся при обсуждении тождественных частиц [1]).

Таким образом, существование полуцелых моментов импульса не противоречит никаким принципам квантовой механики. Действительно, полуцелые моменты существуют в природе.

§ 16. Неприводимые инвариантные подпространства. Матрицы вращений $R^{(J)}$

Как установлено в конце § 5, выражение (60) показывает, что любой оператор вращения есть функция компонент полного момента импульса. Следовательно, векторы пространства $\mathscr{E}^{(J)}$, построенного в § 5, преобразуются при вращении в векторы $\mathscr{E}^{(J)}$, т. е. *пространство* $\mathscr{E}^{(J)}$ *инвариантно относительно вращений* [2]).

Точнее, если $|u\rangle$ — произвольно выбранный вектор этого пространства, то множество векторов $R|u\rangle$, получаемых из $|u\rangle$ вращением, натягивают все пространство $\mathscr{E}^{(J)}$. Пространство, обладающее этим свойством, называется *неприводимым по отношению к вращениям*. Если же, напротив, в $\mathscr{E}^{(J)}$ существовал бы по крайней мере один вектор $|v\rangle$ такой, что множество векторов $R|v\rangle$ натягивало $\mathscr{E}^{(J)}$ лишь частично, то $\mathscr{E}^{(J)}$ было бы приводимым по отношению к вращениям.

Неприводимость $\mathscr{E}^{(J)}$ можно показать следующим образом. Обозначим пространство, натянутое на векторы $R|u\rangle$, через $\mathscr{E}_1^{(J)}$. Тогда $J_+|u\rangle$ принадлежит $\mathscr{E}_1^{(J)}$, так как

$$J_+|u\rangle \equiv (J_x + iJ_y)|u\rangle = \frac{1}{\varepsilon}(1 - i + iR_x(\varepsilon) - R_y(\varepsilon))|u\rangle.$$

То же верно для $J_-|u\rangle$. Более того, любой вектор, полученный применением J_+ или J_- к векторам $\mathscr{E}_1^{(J)}$, принадлежит $\mathscr{E}_1^{(J)}$. Рассмотрим разложение $|u\rangle = \sum_M |JM\rangle\langle JM|u\rangle$ и обозначим m наименьшее значение M, для которого $\langle JM|u\rangle \neq 0$. Следуя методам § 5, получаем, что $J_+^{J-m}|u\rangle$ — ненулевой вектор, пропорцио-

[1]) Общее обсуждение соотношений типа (63) и их следствий — правил суперотбора — приведено в статье *G. Wick, A. Wightman, E. Wigner.* Phys. Rev. 88, 101 (1952). (При наличии русского перевода дается ссылка только на этот перевод. *Прим. перев.*)

[2]) Далее будем использовать заглавные буквы J, M для обозначения квантовых чисел полного момента импульса.

нальный $|JJ\rangle$; отсюда $|JJ\rangle$ принадлежит $\mathscr{E}_1^{(J)}$ и поскольку последовательным применением J_- к $|JJ\rangle$, мы получаем все состояния $|JM\rangle$, они также принадлежат $\mathscr{E}_1^{(J)}$. Следовательно, $\mathscr{E}_1^{(J)}$ содержит полный набор базисных векторов $\mathscr{E}^{(J)}$, и, значит, эти два пространства совпадают. ■ *).

Как указано в § 6, пространство кет-векторов физической системы является прямой суммой некоторого числа $(2J+1)$-мерных подпространств $\mathscr{E}(\tau J)$. Напомним, что τ представляет собой набор квантовых чисел, которые позволяют различать полные наборы квантовых чисел, соответствующие одному собственному значению $\boldsymbol{J}^2$. Каждое из *подпространств* $\mathscr{E}(\tau J)$ является *неприводимым и инвариантным по отношению к вращениям*. В стандартном представлении $\{J^2 J_z\}$ компоненты $\boldsymbol{J}$ в каждом из этих подпространств задаются простыми матрицами, не зависящими от τ. Аналогично любой оператор вращения $R(\alpha\beta\gamma)$ выражается в каждом $\mathscr{E}(\tau J)$ некоторой $(2J+1)$-мерной матрицей $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$, *зависящей от* J, *но не зависящей от квантовых чисел* τ. По определению:

$$R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) \equiv \langle \tau JM \,|\, R(\alpha\beta\gamma) \,|\, \tau JM' \rangle \equiv \langle JM \,|\, \mathrm{e}^{-i\alpha J_z} \mathrm{e}^{-i\beta J_y} \mathrm{e}^{-i\gamma J_z} \,|\, JM' \rangle. \tag{64}$$

Эти матрицы образуют особенно удобное представление операторов $R(\alpha\beta\gamma)$ и используются всякий раз, когда необходимо изменить ориентацию векторов состояния или наблюдаемых. Их называют *матрицами вращений*. Основные свойства этих матриц и явный вид некоторых матриц приведены в Дополнении В (раздел IV).

Непосредственно из определения матриц вращения следует, что $(2j+1)$ базисных векторов подпространства $\mathscr{E}(\tau J)$ преобразуются при вращении $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ по закону

$$R(\alpha\beta\gamma) \,|\, \tau JM \rangle = \sum_{M'} |\, \tau JM' \rangle\, R^{(J)}_{M'M}(\alpha\beta\gamma). \tag{65}$$

Легко показать и обратное, а именно: если $(2J+1)$ векторов $|u_M\rangle$ $(M = -J, -J+1, \ldots, +J)$ преобразуются при вращении согласно закону

$$R(\alpha\beta\gamma) \,|\, u_M \rangle = \sum_{M'} |\, u_{M'} \rangle\, R^{(J)}_{M'M}(\alpha\beta\gamma); \tag{66}$$

то они удовлетворяют уравнениям на собственные значения

$$\boldsymbol{J}^2 \,|\, u_M \rangle = J(J+1) \,|\, u_M \rangle, \quad J_z \,|\, u_M \rangle = M \,|\, u_M \rangle$$

и получаются один из другого действием операторов J_+ и J_- в соответствии с соотношениями (24)—(25).

*) Знаком ■ отмечается конец доказательства. (*Прим. ред.*)

§ 17. Инвариантность относительно вращений и сохранение момента импульса

Инвариантность некоторой величины относительно вращений всегда может быть выражена как ее специальное свойство по отношению к моменту импульса. Действительно, любое вращение можно рассматривать как произведение бесконечно малых вращений, а инвариантность данной величины относительно последних означает ее инвариантность и относительно всех вращений. В силу соотношений (55) момент импульса фигурирует в условии инвариантности относительно бесконечно малых вращений.

Итак, для инвариантности волновой функции или кет-вектора $|\rangle$ относительно вращений необходимо и достаточно, чтобы применение к ним любой компоненты полного момента импульса давало нуль

$$\boldsymbol{J}\,|\rangle = 0.$$

Фактически достаточно, чтобы выполнялось равенство

$$\boldsymbol{J}^2|\rangle = 0. \tag{67}$$

Этим свойством обладают, например, волновые функции частицы в s-состоянии, которые зависят только от переменной r. Другой пример — волновые функции нескольких частиц, зависящие только от расстояний между частицами и от углов между радиусами-векторами частиц [1]).

Для того чтобы наблюдаемая S была инвариантна относительно вращений (условие (53)), необходимо и достаточно, чтобы она коммутировала с компонентами момента импульса

$$[\boldsymbol{J}, S] = 0. \tag{68}$$

Инвариантность гамильтониана относительно вращений заслуживает особого рассмотрения. Если для любого R

$$[R, H] = 0, \tag{69}$$

то *уравнения движения инвариантны относительно вращений*: два вектора состояний, из которых данное вращение преобразует один в другой в момент времени t_0, будут связаны тем же соотношением во все остальные моменты. Это очевидно, поскольку, если $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера, то для любого R имеем

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) R\,|\psi(t)\rangle = R\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)|\psi(t)\rangle = 0$$

[1]) Это свойство можно сравнить с равенством $(l+l')P_l(\cos\alpha) = 0$, возникающим при доказательстве теоремы сложения (задача 5).

и, следовательно, $R|\psi(t)\rangle$ также является решением уравнения Шредингера.

Аналогично, если $|\rangle$ — собственный вектор H, то все векторы вида $R|\rangle$, которые могут быть получены вращением данного, также являются собственными векторами H, отвечающими тому же собственному значению. Другими словами, подпространство каждого собственного значения H инвариантно относительно вращений.

Все следствия инвариантности уравнений движения относительно вращений можно получить из соотношений

$$[\boldsymbol{J}, H]=0, \tag{70}$$

выражающих инвариантность H по отношению к бесконечно малым вращениям.

При выполнении этих соотношений, операторы $\boldsymbol{J}^2$, J_z и H попарно коммутируют, и решение задачи на собственные значения значительно упрощается: достаточно найти собственные функции H среди общих собственных функций $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. Более того, энергетические спектры, отвечающие данному значению J — одни и те же, собственные функции, отвечающие $(2J+1)$ возможным значениям M, получаются одна из другой последовательным применением J_+ или J_-. Другими словами, собственные значения энергии не зависят от M; каждому собственному значению E_J, соответствующему данному значению J, отвечает одна или несколько серий $(2J+1)$ собственных векторов; вектора данной серии получаются друг из друга последовательным применением J_+ или J_- и натягивают неприводимое и инвариантное по отношению к вращениям подпространство. Такой тип вырождения спектра энергии называется *ротационным вырождением*.

Случай частицы в центральном поле (гл. IX) служит хорошей иллюстрацией приведенного обсуждения. Гамильтониан частицы в центральном поле, очевидно, должен быть инвариантен относительно вращений; непосредственно проверяется, что он коммутирует с тремя компонентами момента импульса $\boldsymbol{l}$. Метод, использованный в главе IX, и состоит в нахождении собственных функций H среди общих собственных функций $\boldsymbol{l}^2$ и l_z, отвечающих собственным значениям $l(l+1)$ и m соответственно, т. е. среди функций вида

$$\chi_l(r)\,Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Задача сводится к решению обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка по r. Более того, поскольку m не фигурирует в уравнении, то по каждой радиальной функции мы можем построить $(2l+1)$ собственных функций H, отвечающих одному и тому же собственному значению.

Как отмечалось ранее, мы имеем здесь удивительную аналогию между классической и квантовой механикой. Инвариантность уравнений движения классической системы относительно вращений координатных осей приводит к сохранению полного момента импульса системы. Это свойство позволяет получить первые интегралы движения и значительно упростить решение уравнений. Точно так же инвариантность относительно вращений уравнений движения в квантовой механике ведет к сохранению полного момента; однако из-за некоммутативности компонент момента импульса законы сохранения в этом случае выражаются не столь просто.

Раздел IV. СПИН

§ 18. Гипотеза спина электрона

Теория Шредингера, вытекающая из простого применения принципа соответствия, не может объяснить свойств сложных атомов, даже оставляя в стороне релятивистские поправки. Необходимы две важные модификации, причем ни одна из них не имеет каких-либо аналогий в классической механике, которые позволили бы предсказать их существование. Одна из этих модификаций заключается в выборе только тех решений уравнения Шредингера, которые обладают определенными свойствами симметрии относительно перестановки координат электронов. Это требование известно как принцип Паули и будет рассматриваться в главе XIV; при нижеследующем изложении оно может быть опущено. Другая модификация — гипотеза спина электрона.

Основное экспериментальное подтверждение этой гипотезы следует из анализа поведения сложных атомов в магнитном поле (эффект Зеемана, эксперимент Штерна — Герлаха).

Уравнение Шредингера для атома с Z бесспиновыми электронами уже было приведено выше (ур. (II. 30)). Если считать ядро бесконечно тяжелым, а его положение совпадающим с центром масс, то гамильтониан в системе центра масс имеет простой вид

$$H_0 = \sum_{i=1}^{Z} \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}. \tag{71}$$

Для того чтобы получить гамильтониан того же атома, помещенного в статическое магнитное поле, которое описывается потенциалом $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$, достаточно заменить в выражении (71) каждое $\boldsymbol{p}_i$ на $\boldsymbol{p}_i - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)/c$. В частности, для постоянного магнитного

поля $\mathcal{H}$ $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\mathcal{H}\times\boldsymbol{r})$ и

$$\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2=p^2-\frac{e}{c}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A})+\frac{e^2}{c^2}A^2=$$

$$=p^2-\frac{e}{c}(\mathcal{H}\cdot\boldsymbol{l})+\frac{e^2}{4c^2}\mathcal{H}^2r_\perp^2,$$

где $r_\perp^2$ — квадрат проекции $\boldsymbol{r}$ на плоскость, перпендикулярную полю $\mathcal{H}$. Тогда получаем

$$H=H_0-\frac{e}{2mc}\mathcal{H}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{e^2}{8mc^2}\mathcal{H}^2\sum_{i=1}^{Z}r_{i\perp}^2;$$

$\boldsymbol{L}$ — полный момент импульса Z электронов: $\boldsymbol{L}\equiv\sum_i(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{p}_i)$. Для явлений, которые мы будем рассматривать, вклад третьего члена в этом выражении для гамильтониана пренебрежимо мал [1]). Итак, с очень хорошей точностью имеем

$$H=H_0-\frac{e}{2mc}(\mathcal{H}\boldsymbol{L}). \tag{72}$$

Мы получили такой ответ, как если бы каждый электрон, вращаясь по своей орбите, индуцировал магнитный момент

$$\mu=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{l},$$

пропорциональный своему моменту импульса с константой пропорциональности (гиромагнитное отношение), в точности равной величине $e/2mc$, которую дает классическая теория этого эффекта. При такой интерпретации полный магнитный момент атома равен сумме Z индивидуальных магнитных моментов, т. е.

$$\mathcal{M}=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{L},$$

и энергия атома в поле $\mathcal{H}$ отличается от его энергии при отсутствии поля на величину магнитной энергии $-(\mathcal{M}\mathcal{H})$.

Ряд замечательных свойств можно получить просто из рассмотрения выражения (72), если принять во внимание, что H_0, будучи инвариантным по отношению к вращениям, коммутирует с каждой из компонент оператора $\boldsymbol{L}$.

---

[1]) Этот член играет основную роль в атомном диамагнетизме. Зная, что $\langle r^2\rangle\approx 10^{-16}$ *см*^{2}, можно оценить порядок его величины $(Ze^2/12mc^2)\mathcal{H}^2\langle r^2\rangle$. Отношение этой величины к расстоянию между уровнями $e\hbar\mathcal{H}/2mc$, которое будет получено в дальнейшем, порядка $10^{-9}Z\mathcal{H}$ (*гаусс*), что пренебрежимо мало даже для очень сильных полей и очень тяжелых атомов. Поэтому отбрасывание этого члена не может быть ответственным за приведенные далее расхождения теории и эксперимента.

Направим вектор $\mathcal{H}$ по оси z. Операторы H_0, $\boldsymbol{L}^2$ и L_z имеют общий набор собственных векторов $|nLM\rangle$, а соответствующие собственные значения H_0, E_0^{nL} не зависят от M и $(2L+1)$-кратно вырождены [1]).

Согласно равенству (72) H является функцией H_0 и L_z и, следовательно, имеет тот же набор собственных векторов, а собственное значение оператора H, отвечающее вектору $|nLM\rangle$, равно

$$E^{nLM} = E_0^{nL} - M\mu_B\mathcal{H}, \qquad (73)$$

где мы положили

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad \text{(магнетон Бора)}. \qquad (74)$$

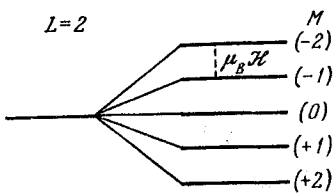


Рис. 2. Эффект Зеемана для D-состояния ($L=2$); слева — уровень энергии при нулевом поле, справа — уровни энергии при $\mathcal{H} \neq 0$.

Так как M может принимать все целые значения от $-L$ до $+L$, то каждый уровень E_0^{nL} под действием магнитного поля $\mathcal{H}$ расщепляется на $(2L+1)$ различных эквидистантных уровней, распределенных по закону (73). Итак, мы можем сделать следующие теоретические предсказания (рис. 2):

(i) каждый уровень E_0^{nL} атомного спектра в постоянном магнитном поле $\mathcal{H}$ расщепляется в «мультиплет» из $(2L+1)$ эквидистантных уровней;

(ii) уровни располагаются по обе стороны от E_0^{nL} таким образом, что их среднее расстояние от E_0^{nL} равно нулю;

(iii) расстояние между двумя соседними уровнями равно $\mu_B\mathcal{H}$ — величина, не зависящая от рассматриваемого атома и пропорциональная $\mathcal{H}$.

Эксперимент лишь частично подтверждает эти теоретические предсказания. Имеется два важных отклонения:

а) в атомах с нечетным Z все мультиплеты четные и дело обстоит так, как если бы $\boldsymbol{L}$ было полуцелым;

б) расстояние между соседними уровнями в одном мультиплете равно $g\mu_B\mathcal{H}$, где множитель g (множитель Ланде) меняется в зависимости от мультиплета в довольно широких пределах.

---

[1]) Кратность вырождения больше, если несколько собственных значений случайно совпадают, как в атоме водорода. Допустим, что $E_0^{nL} = E_0^{n'L'}$, тогда кратность равна $(2L+1)+(2L'+1)$ и необходимо несколько изменить дальнейшие рассуждения. Однако выводы останутся справедливы, если всюду L заменить наибольшей из двух величин L и L'. В частности, утверждение о том, что каждый «мультиплет» Зеемана содержит нечетное число эквидистантных уровней, не меняется.

Существование полуцелого момента импульса непосредственно устанавливается в эксперименте Штерна — Герлаха (§ I. 10). Поскольку почти все атомы, составляющие пучок, находятся в основном состоянии, число наблюдаемых на экране пятен равно кратности вырождения основного состояния. Для атомов серебра мы наблюдаем всего два пятна, следовательно, основное состояние атома серебра двукратно вырождено, что соответствует моменту импульса $^1/_2$. В более общем случае атомы с нечетным Z всегда дают четное число пятен — результат, характеризующий полуцелый момент импульса.

Свойства а) и б) встречаются вместе при изучении аномального эффекта Зеемана; спектральные данные позволяют в общем случае одновременно определить кратность состояний, между которыми происходят оптические переходы, и соответствующие g — множители Ланде.

Чтобы устранить эти затруднения, необходимо ввести полуцелый момент импульса и гиромагнитные отношения, отличные от $e/2mc$. Все это очень просто осуществляется, если принять гипотезу спина электрона (Уленбек и Гоудсмит, 1925):

Каждый электрон обладает внутренним моментом импульса или спином s, *равным* $^1/_2\hbar$ (спин $^1/_2$), *с которым связан магнитный момент*

$$\mu_s = g_s \frac{e}{2mc} s, \tag{75}$$

где g_s — определенная константа. Согласие теории с экспериментом достигается, если положить

$$g_s \approx 2. \tag{76}$$

Релятивистская теория электрона (гл. XX) позволяет вывести это значение g_s.

Эксперименты показывают, что нуклоны (протоны и нейтроны) также обладают спином $^1/_2$, который можно определить непосредственным измерением связанного с ним магнитного момента [1]).

В оставшейся части этого раздела мы изложим нерелятивистскую теорию частиц спина $^1/_2$ (теорию Паули).

---

[1]) Если обозначить магнитный момент, спин и массу протона μ_p, s_p и M_p соответственно, то имеем (см. ур. (75))

$$\mu_p = g_p \frac{e}{2M_pc} s_p.$$

Аналогичная формула справедлива и для нейтрона. Эксперимент дает $g_p = 5{,}59$ и $g_n = -3{,}83$.

§ 19. Спин $^1/_2$ и матрицы Паули

Пусть $\boldsymbol{s}$ — оператор внутреннего момента импульса (или вектор спина) частицы спина $^1/_2$. Согласно гипотезе собственное значение $\boldsymbol{s}^2$ равно $s(s+1)=^3/_4$. Каждая из компонент, например s_z, может принимать одно из двух значений $+^1/_2$ или $-^1/_2$. Будем предполагать эти собственные значения невырожденными. Следовательно, компоненты $\boldsymbol{s}$ будут операторами в пространстве двух измерений, где в качестве базисных векторов можно выбрать два собственных вектора операторов $\boldsymbol{s}^2$ и s_z

$$|+\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ +\frac{1}{2}\right\rangle, \quad |-\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle.$$

В этом базисе легко выписать матрицы, соответствующие операторам s_x, s_y, s_z. Это будут конкретные матрицы J_x, J_y, J_z, матричные элементы которых определяются уравнениями (28).

Кроме коммутационных соотношений для момента импульса, компоненты $\boldsymbol{s}$ удовлетворяют следующим замечательным соотношениям:

$$s_x^2 = s_y^2 = s_z^2 = \frac{1}{4}, \quad s_+^2 = s_-^2 = 0.$$

Поскольку

$$s_+^2 = (s_x + is_y)^2 = (s_x^2 - s_y^2) + i(s_x s_y + s_y s_x),$$

получаем

$$s_x s_y + s_y s_x = 0.$$

Следовательно, операторы s_x, s_y, s_z попарно антикоммутируют [1]).

Удобно ввести *матрицы Паули* $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

$$\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \tag{77}$$

явный вид которых следующий:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Перечислим основные свойства этих матриц, которые следуют из их определения и легко проверяются, если воспользоваться

[1]) Два оператора A и B антикоммутируют, если $AB + BA = 0$.

их явным видом,

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \tag{78}$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z, \tag{79а}$$

$$\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \tag{79б}$$

$$\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y, \tag{79в}$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i, \tag{80}$$

$$\operatorname{Tr}\sigma_x = \operatorname{Tr}\sigma_y = \operatorname{Tr}\sigma_z = 0, \tag{81}$$

$$\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1. \tag{82}$$

Справедливо важное тождество (задача 9)

$$(\sigma\boldsymbol{A})(\sigma\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{AB}) + i\sigma(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}), \tag{83}$$

где $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ — два произвольных вектора [1]).

Поскольку $\boldsymbol{s}$ есть момент импульса, то оператор $R_u^{s)}(\varphi)$, преобразующий векторы данного пространства при вращении $\mathscr{R}_u(\varphi)$, равен, согласно формуле (58),

$$R_u^{(s)}(\varphi) \equiv e^{-\frac{1}{2}i\varphi\sigma_u},$$

где $\sigma_u \equiv (\sigma u)$. Раскладывая экспоненту в ряд и суммируя по отдельности члены четные и нечетные по σ_u, а также используя равенства (см. ур. (83))

$$\sigma_u^{2p} = 1, \quad \sigma_u^{2p+1} = \sigma_u,$$

получаем простое выражение

$$R_u^{(s)}(\varphi) = \cos\frac{1}{2}\varphi - i\sigma_u\sin\frac{1}{2}\varphi. \tag{84}$$

Отметим, что оператор вращения на 2π равен -1, в соответствии с результатами § 15.

Оператор, отвечающий вращению $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$, в силу формулы (60) равен

$$R^{(s)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-\frac{1}{2}i\alpha\sigma_z}e^{-\frac{1}{2}i\beta\sigma_y}e^{-\frac{1}{2}i\gamma\sigma_z}. \tag{85}$$

Его явный вид можно вычислить тем же способом, что и для $\mathscr{R}_u(\varphi)$, ответ приведен в Дополнении В (формула (В. 74)).

Векторы рассматриваемого здесь пространства аналогичны векторам обычного пространства. Последние представляют со-

[1]) Они могут быть также векторными операторами, при условии, что их компоненты коммутируют с σ. В этом случае необходимо сохранить порядок следования $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ в правой части тождества. Например,

$$(\sigma\boldsymbol{r})(\sigma\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{rp}) + i\sigma(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}).$$

бой геометрические объекты с тремя компонентами, которые при вращениях преобразуются друг через друга по определенному закону. Такую же ситуацию мы имеем и для рассматриваемых здесь векторов (закон преобразования (85)), за исключением того, что они имеют две компоненты вместо трех. Эти двухкомпонентные объекты называют *спинорами*.

§ 20. Наблюдаемые и волновые функции частицы спина $^1/_2$. Спинорные поля

Рассмотрим частицу спина $^1/_2$. Основные наблюдаемые такой частицы можно разбить на две категории: орбитальные переменные и внутренние, или спиновые, переменные. Первыми являются компоненты координаты $\boldsymbol{r}$ и импульса $\boldsymbol{p}$; они удовлетворяют коммутационным соотношениям ($\hbar = 1$)

$$[r_i,\ p_j] = i\delta_{ij}.$$

Вторыми являются компоненты спина, удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[s_i,\ s_j] = i\varepsilon_{ijk}s_k,$$

и, кроме этого, дополнительному условию $\boldsymbol{s}^2 = {}^3/_4$.

Поскольку орбитальные переменные коммутируют со спиновыми, пространство векторов состояний частицы $\mathscr{E}$ является тензорным произведением

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}^{(0)} \otimes \mathscr{E}^{(s)}$$

орбитального пространства $\mathscr{E}^{(0)}$ и спинового пространства $\mathscr{E}^{(s)}$ (ср. § VIII. 7). Здесь $\mathscr{E}^{(0)}$ — пространство состояний бесспиновой частицы, а $\mathscr{E}^{(s)}$ — двумерное пространство, построенное в предыдущем параграфе.

Для описания векторов пространства $\mathscr{E}$ обычно выбирают представление с диагональными $\boldsymbol{r}$ и s_z. Вектор состояния $|\psi\rangle$ в таком представлении задается волновой функцией

$$\psi(\boldsymbol{r},\ \mu) \equiv \langle \boldsymbol{r}\mu\,|\,\psi\rangle, \tag{86}$$

которая является функцией непрерывной переменной $\boldsymbol{r} \equiv (x, y, z)$ и дискретной переменной μ, представляющей собственные значения s_z и равной $\pm 1/2$.

Полный момент импульса частицы равен

$$\boldsymbol{j} \equiv \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}. \tag{87}$$

Основные наблюдаемые системы — компоненты трех векторов $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$. Ясно, что $\boldsymbol{j}$ удовлетворяет коммутационным соотношениям (57), характеризующим полный момент импульса, так как $\boldsymbol{l} \equiv$

$\equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ удовлетворяет им и коммутирует с $\boldsymbol{s}$, а $\boldsymbol{s}$ тоже удовлетворяет этим соотношениям и коммутирует с $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$.

Теперь можно получить оператор вращения $R(\alpha\beta\gamma)$ (ур. (60)). Коль скоро $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{s}$ коммутируют, то он равен произведению двух коммутирующих операторов

$$R(\alpha\beta\gamma) = R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)\, R^{(0)}(\alpha\beta\gamma), \tag{88}$$

где $R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)$ определено уравнением (85) и *вращает спин*, а $R^{(0)}(\alpha\beta\gamma)$ определено выражением

$$R^{(0)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha l_z} e^{-i\beta l_y} e^{-i\gamma l_z}$$

и *вращает орбитальные переменные.*

При вращении на 2π, $R^{(0)} = 1$, а $R^{(s)} = -1$ и, следовательно, все кет-векторы при таком вращении меняют знак. Однако все основные наблюдаемые при вращении на 2π не изменяются и, как было показано в § 15, трудностей в их физической интерпретации не возникает.

Часто бывает удобно использовать обозначение

$$\psi\left(\boldsymbol{r}, \pm\frac{1}{2}\right) \equiv \psi_{\pm}(\boldsymbol{r})$$

и записывать волновую функцию $\psi(\boldsymbol{r}, \mu)$ в виде *двухкомпонентной волновой функции*

$$\psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(\boldsymbol{r}) \\ \psi_-(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}.$$

Для каждого значения $\boldsymbol{r}$ функция ψ определяет кет-вектор в пространстве $\mathscr{E}^{(s)}$, а именно

$$\langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle \equiv \psi_+(\boldsymbol{r})|+\rangle + \psi_-(\boldsymbol{r})|-\rangle. \tag{89}$$

Другими словами, волновую функцию можно рассматривать как спинорное поле [1]).

Рассмотрение системы Z частиц спина $^1/_2$ производится совершенно аналогично. Пространством состояний системы является тензорное произведение пространств состояний отдель-

---

[1]) При вращении $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ спинорное поле ψ преобразуется в

$$\mathscr{R}[\psi] = R\psi = R^{\left(\frac{1}{2}\right)} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathscr{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \\ \psi_-(\mathscr{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \end{pmatrix},$$

что является непосредственным следствием (88); $R^{\left(\frac{1}{2}\right)}$ — матрица вращений, соответствующая $J = {}^1/_2$. Можно сравнить этот закон преобразования с формулой (47) для скалярного поля. Существует аналогичная формула для векторного поля с $R^{(1)}$ вместо $R^{\left(\frac{1}{2}\right)}$ (см. § 21).

ных частиц. Так, спиновое пространство есть тензорное произведение Z индивидуальных спиновых пространств и имеет размерность 2^Z. Для каждого спина вводится система матриц Паули $\sigma^{(i)}$. Вращение всех спинов как целое можно выполнить, используя полный спин

$$S = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{Z} \sigma^{(i)}. \tag{90}$$

Вращение на 2π системы спинов задается оператором $(-1)^Z$.

§ 21. Векторные поля и частицы спина 1

Полезно подчеркнуть параллель между понятием спинорного поля и более известным понятием векторного поля.

Пусть $A(r)$ — векторное поле, связанное с физической системой. Им может быть, например, магнитное или электрическое поле или, как мы увидим ниже, волновая функция частицы спина 1.

Рассмотрим как преобразуется $A(r)$ при вращениях. Пусть $A'(r)$ — поле, которое получилось из $A(r)$ в результате вращения $\mathcal{R}$ физической системы

$$A' \equiv \mathcal{R}[A].$$

Поле A' в точке r получается вращением $\mathcal{R}$ вектора $A(r_1)$, задающего поле A в точке $r_1 \equiv \mathcal{R}^{-1}r$, т. е. (см. ур. (43) и (47))

$$A'_i(r) = \mathcal{R}_{ij}A_j(\mathcal{R}^{-1}r) \qquad (i = x, y, z).$$

Так, для вращения на угол α вокруг Oz находим (см. ур. (44))

$$A' \equiv \mathcal{R}_z(\alpha)[A], \quad r_1 \equiv (x\cos\alpha + y\sin\alpha, -x\sin\alpha + y\cos\alpha, z),$$

$$A'_x(r) = A_x(r_1)\cos\alpha - A_y(r_1)\sin\alpha,$$

$$A'_y(r) = A_x(r_1)\sin\alpha + A_y(r_1)\cos\alpha,$$

$$A'_z(r) = A_z(r_1).$$

В частности, инфинитезимальное вращение на угол ε вокруг Oz дает

$$\mathcal{R}_z(\varepsilon)[A] = (1 - i\varepsilon(l_z + s_z))A, \tag{91}$$

где l_z — определенный выше дифференциальный оператор, а s_z — оператор, определяемый равенством

$$s_z\begin{pmatrix} A_x(r) \\ A_y(r) \\ A_z(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -iA_y(r) \\ iA_x(r) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Оператор s_z преобразует каждую компоненту поля в данной точке в некоторую линейную комбинацию трех компонент поля в той же точке. Если поле A определяется тремя декартовыми составляющими A_x, A_y и A_z, то s_z задается матрицей

$$s_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично определяются операторы s_x и s_y, их матрицы имеют вид

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

Легко показать, что s_x, s_y, s_z удовлетворяют коммутационным соотношениям, характеризующим компоненты момента импульса. Обозначим этот момент через $\boldsymbol{s}$; вычисляя его квадрат, получаем

$$\boldsymbol{s}^2 = 2,$$

что соответствует моменту импульса $s = 1$. По определению, будем называть s — внутренним моментом или спином векторного поля.

Поле $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ может описывать частицу спина 1. Обозначим

$$A_i(\boldsymbol{r}) \equiv A(\boldsymbol{r}, i) \qquad (i = x, y, z),$$

где $A(\boldsymbol{r}, i)$ — волновая функция, зависящая не только от координат частицы, но и от индекса i, который может принимать три значения и представляет внутреннюю переменную, описывающую ориентацию частицы. Скалярное произведение таких волновых функций равно

$$\langle B, A\rangle \equiv \sum_i \int B^*(\boldsymbol{r}, i) A(\boldsymbol{r}, i)\, d\boldsymbol{r} = \int (\boldsymbol{B}^* \cdot \boldsymbol{A})\, d\boldsymbol{r}. \tag{92}$$

Оператор $\boldsymbol{l}$ действует только на пространственные координаты, в то же время $\boldsymbol{s}$ действует только на внутренние переменные. Ясно, что операторы $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{s}$, действуя на разные переменные, коммутируют. Оператор инфинитезимального вращения вокруг оси z определяется уравнением (91), аналогично получается оператор инфинитезимального вращения вокруг любой другой оси; используя определение (55), находим полный момент импульса частицы (см. ур. (87))

$$\boldsymbol{j} \equiv \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}.$$

Верно и более общее утверждение: любое линейное преобразование векторного поля можно представить как действие некоторого линейного оператора, который выражается в виде функции от трех основных операторов

$$\boldsymbol{r}, \quad \boldsymbol{p} \equiv -i\nabla, \quad \boldsymbol{s}.$$

В частности, справедливо важное тождество

$$\mathrm{rot} \equiv \boldsymbol{sp}, \tag{93}$$

которое легко проверить, пользуясь определением ротора и явным видом матриц s_x, s_y, s_z.

Понятия скалярного произведения, вращения, линейного преобразования, не зависят от выбранного представления. Волновая функция $A(\boldsymbol{r}, i)$ задает динамическое состояние частицы в представлении, где базисные векторы внутренней переменной соответствуют единичным векторам вдоль каждой из трех осей Ox, Oy, Oz; эти базисные векторы $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ являются собственными векторами операторов s_x, s_y, s_z соответственно, с собственным значением 0 (см. задачу 10). Часто удобнее использовать представление, где базисными векторами являются собственные векторы оператора s_z, $|+\rangle$, $|0\rangle$, $|-\rangle$ с собственными значениями $+1$, 0, -1 соответственно; они получаются друг из друга согласно закону, определенному в § 6. В этом представлении s_x, s_y и s_z задаются матрицами, которые удовлетворяют соотношениям (28) (с $j = j' = 1$), а связанный с векторным полем $\boldsymbol{A}$ кет-вектор $|A\rangle$ задается волновой функцией

$$A(\boldsymbol{r}, \mu) \equiv A_\mu(\boldsymbol{r}) \qquad (\mu = +, 0, -).$$

Согласно определению (ср. ур. (89))

$$\langle \boldsymbol{r} \mid A\rangle \equiv A_+(\boldsymbol{r})\mid +\rangle + A_0(\boldsymbol{r})\mid 0\rangle + A_-(\boldsymbol{r})\mid -\rangle$$

имеем

$$A_+ = -\frac{\sqrt{2}}{2}(A_x - iA_y), \quad A_0 = A_z, \quad A_- = \frac{\sqrt{2}}{2}(A_x + iA_y). \tag{94}$$

§ 22. Зависящие от спина взаимодействия в атомах

Вследствие существования внутреннего магнитного момента гамильтониан *электрона в электромагнитном поле* содержит члены, зависящие от спина.

В частности, в присутствии магнитного поля $\mathcal{H}(\boldsymbol{r})$ в гамильтониане появляется слагаемое, которое описывает *прямое взаимодействие* и получается из принципа соответствия,

$$-\mu\mathcal{H}(\boldsymbol{r}) \equiv -\mu_B\sigma\mathcal{H},$$

где μ — внутренний магнитный момент, определяемый уравнениями (75)—(76).

Это не единственный дополнительный член. Даже в случае чисто электростатического потенциала должны существовать члены *спин-орбитального взаимодействия*, поскольку при движении в таком потенциале в системе, движущейся с электроном, имеется магнитное поле, взаимодействующее с μ. Это классическое рассуждение может служить указанием для эмпирического определения спин-орбитального взаимодействия. Однако поскольку речь идет о релятивистском эффекте (стремящемся к нулю в пределе $v \ll c$), предпочтительнее исходить из релятивистского уравнения для электрона. Вид спин-орбитального взаимодействия из этого уравнения можно получить, выполняя разложение по параметру v/c и сохраняя ненулевые члены низшего порядка. Эта задача будет исследована в главе XX. Спин-орбитальное взаимодействие для сферически-симметричного потенциала, очевидно, инвариантно относительно вращений и, следовательно, коммутирует с тремя компонентами полного момента импульса $\boldsymbol{j}$. Релятивистская теория дает выражение

$$\frac{\hbar^2}{2m^2c^2}(\boldsymbol{ls})\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}. \tag{95}$$

По тем же причинам гамильтониан H_0 для Z электронов сложного атома содержит спин-орбитальные члены в дополнение к кулоновским, приведенным в ур. (71). Дополнительные члены коммутируют с полным моментом импульса

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S},$$

но в отличие от остальных членов H_0 они не коммутируют с $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{S}$ по отдельности. Более того, хотя вклад этих членов в полную энергию относительно мал (исключая самые тяжелые

атомы), их присутствие качественно изменяет атомный спектр — устраняет вырождение и, следовательно, ими никогда нельзя пренебрегать [1]).

Гамильтониан H атома в постоянном магнитном поле $\mathcal{H}$ получается из гамильтониана H_0 без внешнего поля тем же способом, что и в § 18, и добавлением членов прямого магнитного взаимодействия — $\sum_i \boldsymbol{\mu}^{(i)}\mathcal{H}$. Если пренебречь, как и в уравнении (72) для теории без спина, «диамагнитным членом» $\sim\mathcal{H}^2$, то получим

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}[\mathcal{H}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})]. \tag{96}$$

§ 23. Зависящие от спина нуклон-нуклонные взаимодействия

В качестве второго примера зависящих от спина взаимодействий рассмотрим взаимодействие двух нуклонов, нейтронов или протонов. Пусть M_0 — масса нуклонов, $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ — их относительная координата, $\boldsymbol{p}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)$ — относительный импульс, $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1$ и $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$ — соответствующие спины. Движение центра масс и относительное движение полностью разделяются. Рассматриваемые ниже динамические переменные и динамические состояния относятся исключительно к относительному движению. Орбитальный момент импульса равен

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p},$$

полный спин

$$\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{97}$$

и полный момент импульса

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}. \tag{98}$$

Гамильтониан имеет вид

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{M_0}+V.$$

Чаще всего используются четыре типа взаимодействий, которые инвариантны, относительно вращений

$$V_1(r), \tag{99а}$$

$$V_2(r)(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2), \tag{99б}$$

$$V_3(r)(\boldsymbol{LS}), \tag{99в}$$

$$V_4(r)\left[3\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{r})}{r^2}-\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\right]. \tag{99г}$$

[1]) Следовало бы также упомянуть об изменениях, вызванных существованием магнитного момента у ядер атомов (сверхтонкая структура).

В трех последних выражениях зависящие от спина операторы записаны в их традиционном виде. Можно записать их и по-другому. Так, возводя обе части (97) в квадрат и используя тождество

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 3,$$

получаем

$$\sigma_1\sigma_2 = 2S^2 - 3, \tag{100}$$

а возводя в квадрат обе части (98), получаем

$$LS = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2). \tag{101}$$

Наконец, из ур. (97) имеем

$$(Sr)^2 = \frac{1}{4}[(\sigma_1 r) + (\sigma_2 r)]^2 = \frac{1}{4}[(\sigma_1 r)^2 + (\sigma_2 r)^2 + 2(\sigma_1 r)(\sigma_2 r)] =$$
$$= \frac{1}{2}[(\sigma_1 r)(\sigma_2 r) + r^2].$$

Отсюда

$$(\sigma_1 r)(\sigma_2 r) = 2(Sr)^2 - r^2,$$

и, следовательно,

$$S_{12} \equiv 3\frac{(\sigma_1 r)(\sigma_2 r)}{r^2} - \sigma_1\sigma_2 \tag{102}$$

$$= 2\left[3\frac{(Sr)^2}{r^2} - S^2\right]. \tag{102'}$$

Оператор S_{12} называется «тензорный оператор», а взаимодействие (99г) — «тензорные силы».

Если V — линейная комбинация взаимодействий типа (99), то гамильтониан будет инвариантен относительно как вращений, так и отражений (при отражении r и p переходят в $-r$ и $-p$, а операторы спина не меняются). Мы еще вернемся к свойству инвариантности относительно отражений. Отметим только, что если обозначить P — оператор, который, действуя на $\psi(r)$, дает $\psi(-r)$, то его собственные функции будут обладать определенной четностью. Инвариантность относительно отражений означает, что $[H, P] = 0$. Если гамильтониан обладает указанным свойством, то его собственные функции можно искать среди функций с определенной четностью.

Взаимодействия (99) расположены в порядке уменьшения их симметрии.

Первое не зависит от спина. Второе коммутирует с L и S по отдельности: оно инвариантно не только по отношению к общим вращениям, но и к вращениям только орбитальных переменных или только спинов. Если V содержит лишь члены вида (99а) и (99б), то собственные функции H можно искать среди общих

собственных функций $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, L_z, S_z, и соответствующие собственные значения будут $(2L+1)(2S+1)$-кратно вырождены и не будут зависеть от собственных значений L_z и S_z.

Если же V содержит также член вида (99в), то H будет все еще коммутировать с $\boldsymbol{L}^2$ и $\boldsymbol{S}^2$, но перестанет быть инвариантным относительно независимых вращений пространственных координат и спинов. Собственные функции H в этом случае можно искать среди общих собственных функций $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z, а его собственные значения будут иметь вращательное вырождение только кратности $(2J+1)$.

Взаимодействие (99г) имеет наименьшую симметрию. Оператор S_{12} не коммутирует с $\boldsymbol{L}^2$. Однако он еще коммутирует с $\boldsymbol{S}^2$ (из выражения (102′) для тензорного оператора видно, что $[\boldsymbol{S}^2, S_{12}]=0$). Если V содержит член вида (99г), то собственные функции H можно искать среди общих собственных функций операторов P, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z.

Раздел V. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ ИМПУЛЬСА

§ 24. Задача сложения

Во многих задачах гамильтониан инвариантен относительно вращений и, следовательно, коммутирует с компонентами полного момента импульса. В этом случае мы ищем собственные функции H среди общих собственных функций $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. При этом важно уметь перечислять и строить векторы с определенным моментом (JM).

В простом случае бесспиновой частицы в центральном поле (гл. IX) полный момент импульса совпадает с орбитальным моментом $\boldsymbol{l}$ и собственные функции полного момента имеют вид $\chi(r)\,Y_l^m(\theta, \varphi)$. В общем случае $\boldsymbol{J}$ есть сумма моментов отдельных частиц

$$\boldsymbol{J}=\sum_i \boldsymbol{j}_i,$$

т. е. орбитальных моментов импульса и спинов частиц системы.

Метод построения собственных векторов индивидуальных моментов известен. Так, для системы двух нуклонов, рассмотренной в § 13, имеем

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1+\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2, \tag{103}$$

а собственные функции индивидуальных моментов импульса имеют вид $\psi(r)\,Y_l^m(\theta, \varphi)|\mu_1\rangle|\mu_2\rangle$, где μ_1 и μ_2 могут принимать значения $+1/2$ или $-1/2$, в зависимости от направления спинов

первого и второго нуклонов вверх или вниз соответственно. Задача *сложения* моментов импульса состоит в построении полной системы собственных векторов оператора $\boldsymbol{J}$ из линейных комбинаций этих функций.

§ 25. Теорема сложения двух моментов импульса

Простейшей задачей является сложение *двух* моментов. Предположим, что

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2,$$

где $\boldsymbol{j}_1$ и $\boldsymbol{j}_2$ — моменты импульса систем 1 и 2, которые вместе образуют исследуемую систему, и предположим, что построена полная система общих собственных векторов

$$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \tag{104}$$

операторов $\boldsymbol{j}_1^2$, $\boldsymbol{j}_2^2$, j_{1z} и j_{2z}. Параметр α обозначает дополнительные квантовые числа, которые необходимы для полного определения динамического состояния, или, если угодно, собственные значения наблюдаемых A, образующих с $\boldsymbol{j}_1^2$, $\boldsymbol{j}_2^2$, j_{1z} и j_{2z} полный набор коммутирующих наблюдаемых; A коммутируют также с компонентами $\boldsymbol{j}_1$ и $\boldsymbol{j}_2$. Предположим к тому же, что векторы (104) образуют стандартный базис по отношению к моментам импульса 1 и 2. Каждому набору квантовых чисел $(\alpha j_1 j_2)$ соответствует столько векторов, сколько имеется различных пар $(m_1 m_2)$; эти векторы получаются один из другого последовательным применением операторов $j_{1\pm}$ и $j_{2\pm}$ по формулам § 6 и натягивают подпространство $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$ размерности $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.

Отметим, что A, $\boldsymbol{j}_1^2$ и $\boldsymbol{j}_2^2$ коммутируют с $\boldsymbol{J}$. Поэтому будем искать собственные векторы $\boldsymbol{J}^2$ и J_z среди общих собственных векторов этих операторов, а значит каждое из подпространств $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$ можно рассматривать независимо. Возьмем произвольное $\mathscr{E}$ и для упрощения записи обозначим векторы $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ этого подпространства $|m_1 m_2\rangle$, а собственные векторы полного момента импульса, находящиеся в этом подпространстве, $|JM\rangle$ (предполагая, что задание J и M достаточно для определения вектора $|JM\rangle$, в дальнейшем покажем, что это так).

В этом параграфе мы определим возможные значения пар (JM) и соответствующий им порядок вырождения. Построение собственных векторов будет обсуждаться в § 27.

Решение нашей задачи основано на следующих двух замечаниях:

(а) Каждый вектор $|m_1 m_2\rangle$ является собственным для J_z с собственным значением

$$M = m_1 + m_2.$$

Действительно, поскольку $J_z = j_{1z} + j_{2z}$, имеем $J_z|m_1m_2\rangle = (m_1 + m_2)|m_1m_2\rangle$.

(б) Каждому значению J соответствует некоторое число $N(J)$ линейно независимых серий из $(2J+1)$ собственных векторов полного момента импульса; векторы данной серии получаются один из другого последовательным применением J_+ или J_- и соответствуют $(2J+1)$ возможным значениям M: $-J, -J+1, \ldots, +J$.

Отсюда следует [1]), что если обозначить $n(M)$ кратность собственного значения M, то

$$n(M) = \sum_{J \geqslant |M|} N(J)$$

и

$$N(J) = n(J) - n(J+1). \qquad (105)$$

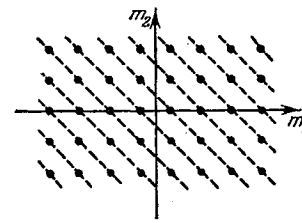


Рис. 3. Возможные значения $M = m_1 + m_2$ и их кратность $n(M)$ ($j_1 = 7/2$, $j_2 = 2$).

Тем самым для определения $N(J)$ достаточно найти $n(M)$ для каждого возможного значения M. Согласно замечанию $n(M)$ равно числу пар (m_1m_2) таких, что

$$M = m_1 + m_2.$$

Для определения этого числа удобно использовать диаграмму рис. 3, на которой каждая пара $(m_1 + m_2)$ представлена точкой с абсциссой m_1 и ординатой m_2. Число $n(M)$ равно числу точек, расположенных на прямой $x + y = M$. Пусть для определенности $j_1 > j_2$, тогда находим

$$n(M) = \begin{cases} 0, & \text{если } |M| > j_1 + j_2, \\ j_1 + j_2 + 1 - |M|, & \text{если } j_1 + j_2 \geqslant |M| \geqslant |j_1 - j_2|, \\ 2j_2 + 1, & \text{если } |j_1 - j_2| \geqslant |M| \geqslant 0. \end{cases}$$

Подставляя эти значения в (105), получаем

$$N(J) = 1 \quad \text{для} \quad J = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1, \ldots, |j_1 - j_2|.$$

Отсюда следует основная теорема сложения:

В $(2j_1+1)(2j_2+1)$-мерном пространстве, натянутом на векторы $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ (α, j_1j_2 фиксированы, m_1, m_2 меняются):

(i) *возможные значения J равны* [2])

$$j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1, \ldots, |j_1 - j_2|;$$

---

[1]) Такие же рассуждения уже использовались в задаче о трехмерном гармоническом осцилляторе (§ XII. 15).

[2]) Другими словами, J принимает все значения, для которых $j_1 + j_2 + J$ — целое и j_1, j_2 и J могут рассматриваться как длины сторон треугольника.

(ii) *каждому из этих значений отвечает одна и только одна серия из* $(2J+1)$ *собственных векторов* $|JM\rangle$ *полного момента импульса.*

§ 26. Приложения и примеры

Вначале отметим очевидное следствие теоремы сложения. Полный момент импульса, получающийся сложением произвольного числа моментов, будет целым или полуцелым в зависимости от того, четно или нечетно число полуцелых моментов импульса в сумме.

Мы увидим, что это свойство выполняется во всех нижеследующих примерах.

В качестве первого примера рассмотрим сложение двух спинов $^1/_2$.

Пространство состояний имеет размерность 4. Полный спин S может принимать два значения: 0 и 1.

Спину $S=0$ соответствует только один вектор $|00\rangle$: говорят, что спин находится в *синглетном* состоянии.

Спину $S=1$ соответствуют три вектора $|1\,1\rangle$, $|1\,0\rangle$, $|1\,-1\rangle$; это векторы *триплетного* состояния.

Легко выписать проекторы P_0 и P_1 на синглетное и триплетное состояния соответственно, как функции S^2 или $\sigma_1\sigma_2$. Поскольку $S^2=S(S+1)$, S^2 имеет собственное значение 0 в синглетном состоянии и 2 — в триплетном, отсюда (ср. с (100))

$$P_0=1-\frac{1}{2}S^2=\frac{1}{4}(1-\sigma_1\sigma_2)$$

$$P_1=\frac{1}{2}S^2=\frac{1}{4}(3+\sigma_1\sigma_2).$$

Заметим, что

$$\sigma_1\sigma_2=P_1-3P_0. \tag{106}$$

Второй пример — частица спина $^1/_2$. Ее орбитальный момент импульса и спин образуют полный момент j, который может принимать два значения

$$j=l+\frac{1}{2},\quad j=l-\frac{1}{2},$$

за исключением случая $l=0$ (s-состояние), когда j может принимать только одно значение $j=^1/_2$. Итак, j может принимать все полуцелые значения, от $^1/_2$ до ∞, и каждому из них соответствует два терма (две серии из $(2j+1)$ векторов) *противоположной четности.*

В качестве последнего примера рассмотрим двухнуклонную систему из § 23.

В этом случае необходимо связать три момента импульса — орбитальный момент и два спина (ур. (98)). Сложим вначале

спины, что дает полный спин $\boldsymbol{S}$, который имеет два возможных значения 0 и 1. Затем свяжем $\boldsymbol{S}$ с моментом импульса $\boldsymbol{L}$ для относительной координаты, который может принимать все целые неотрицательные значения. Каждой паре значений (LS) отвечает $(2S+1)(2L+1)$ векторов, подходящие линейные комбинации которых дают собственные векторы полного момента. Согласно теореме сложения получаем следующие значения J:

синглетное состояние: $S=0$ $\quad J=L$;

триплетное состояние: $S=1$ $\quad \begin{cases} J=L-1, L, L+1, \text{ если } L\neq 0, \\ J=1, \qquad\qquad \text{если } L=0. \end{cases}$

Для обозначения полученных термов используем следующие спектроскопические обозначения: заглавная буква отвечает значению L в соответствии с принятым в § IX. 6 соглашением; индекс слева вверху дает значение $2S+1$ (кратность полного спина), а индекс справа внизу равен J. Например, $^3D_2$ означает терм с $L=2$, триплетное состояние спина и полный момент $J=2$. Каждому значению J соответствуют 4 терма (т. е. всего $4(2J+1)$ векторов), исключение — значение $J=0$, которому соответствует только два терма. Ниже приводятся различные термы, соответствующие четырем первым значениям:

$J=0$		$^3P_0$		$^1S_0$
$J=1$	$^3S_1$	$^3D_1$	$^3P_1$	$^1P_1$
$J=2$	$^3P_2$	$^3F_2$	$^3D_2$	$^1D_2$
$J=3$	$^3D_3$	$^3G_3$	$^3F_3$	$^1F_3$.

Те же обозначения часто используются и для рассмотренного выше случая частицы спина $^1/_2$. Орбитальный момент обозначается строчной буквой — заглавными будет обозначаться полный орбитальный момент системы многих частиц — индекс слева просто опускается. Приведем термы, отвечающие первым значениям j:

$$j= \quad \frac{1}{2} \qquad \frac{3}{2} \qquad \frac{5}{2} \qquad \frac{7}{2}$$

$$s_{\frac{1}{2}}p_{\frac{1}{2}} \qquad p_{\frac{3}{2}}d_{\frac{3}{2}} \qquad d_{\frac{5}{2}}f_{\frac{5}{2}} \qquad f_{\frac{7}{2}}g_{\frac{7}{2}}.$$

§ 27. Собственные векторы полного момента импульса. Коэффициенты Клебша — Гордана

Каждой паре (JM), которая удовлетворяет условиям теоремы сложения, соответствует собственный вектор $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ полного момента импульса. Для устранения произвола нормируем этот вектор на 1 и фиксируем его фазу подходящим условием, к обсуждению которого мы вернемся ниже. Векторы

$|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$, так же как и $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$, образуют ортонормированный базис в подпространстве $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$. Переход от одного базиса к другому совершается посредством унитарного преобразования

$$|\alpha j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle \alpha j_1 j_2 m_1 m_2 | \alpha j_1 j_2 JM\rangle. \qquad (107)$$

Коэффициенты этого преобразования обладают очень важным свойством: *они не зависят от* α, *а зависят только от величин* j_1, j_2, J, m_1, m_2, M. Действительно, в подпространстве $\mathscr{E}(\alpha j_1 j_2)$ векторы $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ образуют базис стандартного представления, в котором компоненты j_1 и j_2 задаются матрицами, не зависящими от α (см. ур. (28)); следовательно, матрицы, определяющие J^2 и J_z, также не зависят от α и компоненты $\langle \alpha j_1 j_2 m_1 m_2 | \alpha j_1 j_2 JM\rangle$ их общих собственных векторов обладают тем же свойством. Тем самым, они имеют чисто геометрическое происхождение и зависят только от рассматриваемого момента импульса и его ориентации, тогда как физическая природа динамических переменных 1 и 2, из которых строятся моменты, не существенна. Эти компоненты называют *коэффициентами Клебша — Гордана* (К. — Г.) или коэффициентами векторного сложения. Мы будем обозначать их символом $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$. Используя это обозначение, соотношение (107) можно записать так:

$$|\alpha j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle. \qquad (108)$$

Для полного определения коэффициентов К. — Г. остается фиксировать фазы векторов $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$. Для относительных фаз $(2J+1)$ векторов, отвечающих данному J, мы примем то же соглашение, что и в § 6. Тогда эти векторы определены с точностью до фазы, зависящей от J. Мы устраним этот произвол требованием, чтобы компонента $|\alpha j_1 j_2 JJ\rangle$ вдоль $|\alpha j_1 j_2 j_1 J - j_1\rangle$ была вещественной и положительной

$$\langle j_1 j_2 j_1 m_2 | JJ\rangle \geqslant 0. \qquad (109)$$

Многие свойства коэффициентов К. — Г. следуют непосредственно из их определения.

Согласно теореме сложения для отличия $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$ от нуля необходимо, чтобы выполнялись одновременно условия (*правила отбора*)

$$m_1 + m_2 = M, \quad |j_1 - j_2| \leqslant J \leqslant j_1 + j_2.$$

Ниже мы покажем, что все коэффициенты К. — Г., относящиеся к данному значению J, могут быть получены посредством рекуррентных соотношений с вещественными коэффициентами из коэффициента $\langle j_1 j_2 j_1 J - j_1 | JJ\rangle$. Поскольку последний веще-

ственный, то и все остальные коэффициенты К. — Г. вещественны.

Более того, поскольку это коэффициенты унитарного преобразования, то они удовлетворяют *соотношениям ортогональности*

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J'M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}, \qquad (110а)$$

$$\sum_{JM} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'}. \qquad (110б)$$

В простейших случаях линейные комбинации (108) можно найти непосредственно. Отметим, что для $J = j_1 + j_2$ и $M = J$ имеем

$$|\alpha j_1 j_2 j_1 + j_2 j_1 + j_2\rangle = |\alpha j_1 j_2 j_1 j_2\rangle.$$

Последовательное применение $J_- \equiv j_{1-} + j_{2-}$ к обеим частям этого уравнения дает все векторы $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$, отвечающие $J = j_1 + j_2$. Затем можно построить векторы серии $J = j_1 + j_2 - 1$, используя оператор J_- и начиная с вектора, соответствующего $M = J$, который однозначно определяется условием на фазу (109) и свойством ортогональности к $|\alpha j_1 j_2 j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle$. Таким образом, можно построить все серии собственных векторов.

При сложении двух спинов $^1/_2$ собственные векторы полного спина можно построить таким же способом из собственных векторов $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$ и $|--\rangle$ операторов спинов отдельных частиц

	$S=1$	$S=0$
$M=1$	$\|11\rangle = \|++\rangle$	
$M=0$	$\|10\rangle = \dfrac{\|+-\rangle + \|-+\rangle}{\sqrt{2}}$	$\|00\rangle = \dfrac{\|+-\rangle - \|-+\rangle}{\sqrt{2}}$
$M=-1$	$\|1\,-1\rangle = \|--\rangle$.	

При сложении моментов импульса большей величины необходимо прибегнуть к более сложной технике. Можно установить различные рекуррентные соотношения (ур. (В. 18)—(В. 20)). Например, применяя J_+ или J_- к обеим частям уравнения (108), получаем (см. ур. (В. 19) и (В. 18))

$$\sqrt{J(J+1) - M(M+1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM+1\rangle = \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)}\langle j_1 j_2 m_1 - 1 m_2 | JM\rangle + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 - 1 | JM\rangle, \qquad (111)$$

$$\sqrt{J(J+1) - M(M-1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM-1\rangle = \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)}\langle j_1 j_2 m_1 + 1 m_2 | JM\rangle + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 + 1 | JM\rangle. \qquad (112)$$

Если $M = J$, то левая часть (111) исчезает и видно, что все коэффициенты $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JJ\rangle$ пропорциональны одному из них, скажем $\langle j_1 j_2 j_1 J - j_1 | JJ\rangle$. Условие нормировки вектора $|\alpha j_1 j_2 JJ\rangle$ $\left(\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JJ\rangle^2 = 1\right)$ и соглашение о фазе (109) определяет их полностью. Все другие коэффициенты К. — Г. можно затем получить, последовательно используя рекуррентные соотношения (112). Такой метод вычисления коэффициентов К. — Г. для записи их в компактной форме (B. 21)[1]) применялся Рака.

Кроме уже упомянутых свойств, коэффициенты К. — Г. обладают важными *свойствами симметрии*, которые значительно упрощают табулирование. Вместе с основными свойствами коэффициентов К. — Г. эти свойства симметрии приведены в Дополнении В (раздел I), которое содержит также таблицу простейших коэффициентов.

§ 28. Приложение: система двух нуклонов

Для того чтобы рассмотреть применения теоремы сложения угловых моментов, вернемся к системе двух нуклонов из § 23. Мы будем исследовать уравнение Шредингера с различной формой зависимости потенциала от спина. Ограничимся рассмотрением потенциалов (99).

Допустим, что потенциал имеет вид

$$V = V_1(r) + V_2(r)(\sigma_1\sigma_2).$$

В этом случае гамильтониан коммутирует с $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{S}$ и собственные функции являются произведениями спиновых функций $|S\mu\rangle$ и функций от $\boldsymbol{r}$ с определенным орбитальным моментом (lm). В силу тождества (106) потенциал имеет различный вид в зависимости от того, равно ли S нулю или единице. Таким образом, решение уравнения Шредингера эквивалентно решению двух уравнений Шредингера для бесспиновой частицы в центральных потенциалах, которые отвечают двум возможным значениям S. Если $S = 0$, то орбитальная часть собственной функции та же, что и для бесспиновой частицы в потенциале $V_1 - 3V_2$; если же $S = 1$, то она та же, что и для частицы в потенциале $V_1 + V_2$. Проблема определения собственных значе-

[1]) Для того чтобы провести это вычисление до конца, необходимо воспользоваться полученным Рака тождеством

$$\sum_s \frac{(a+s)!\,(b-s)!}{(c+s)!\,(d-s)!} = \frac{(a+b+1)!\,(a-c)!\,(b-d)!}{(c+d)!\,(a+b-c-d+1)!}$$

(a, b, c, d — целые числа и $a \geqslant c \geqslant 0$, $b \geqslant d \geqslant 0$; s принимает все целые значения от $-c$ до $+d$).

ний свелась к решению радиального уравнения для каждой пары значений (LS).

Если потенциал имеет вид

$$V = V_1(r) + V_2(r)(\sigma_1\sigma_2) + V_3(r)(\boldsymbol{LS}),$$

то гамильтониан не инвариантен относительно независимых вращений пространства и спинов, но поскольку он все еще коммутирует с $\boldsymbol{L}^2$ и $\boldsymbol{S}^2$, можно искать общие собственные функции $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. Каждому набору (LSJ) отвечают такие функции, зависимость которых от углов θ, φ и от спиновых переменных полностью определена и явно выражается с помощью коэффициентов К. — Г.

$$\begin{aligned} \Psi^M_{LSJ} &\equiv F(r)\,\mathcal{Y}^M_{LSJ}, \\ \mathcal{Y}^M_{LJ} &= \sum Y^m_L(\theta, \varphi)\,|\,S\mu\rangle\,\langle LSm\mu\,|\,JM\rangle. \end{aligned} \tag{113}$$

Так, три функции состояния P_1 имеют следующую «угловую зависимость»: $\mathcal{Y}^M_{101} = Y^M_1|\,00\rangle$ $(M = 0, \pm 1)$. Пять функций состояния $^3D_2$ имеют вид

$$\mathcal{Y}^M_{212} = \sum_{m\mu} Y^m_2\,|\,1\mu\rangle\,\langle 21m\mu\,|\,2M\rangle \quad (M = 0,\ \pm 1,\ \pm 2).$$

Действуя гамильтонианом на функции такого типа и используя тождества (100) и (101), получаем

$$H\Psi^M_{LSJ} = \left[-\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2}{M_0}\frac{L(L+1)}{r^2} + V_{LSJ}\right]\Psi^M_{LSJ},$$

где

$$V_{LSJ}(r) = V_1(r) + [2S(S+1) - 3]\,V_2(r) + \\ + \frac{1}{2}[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]\,V_3(r).$$

Таким образом, задача о решении уравнения Шредингера свелась к решению радиального уравнения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2}{M_0}\frac{L(L+1)}{r^2} + V_{LSJ}(r)\right]F(r) = EF(r).$$

Мы получили такую же задачу, как и в случае бесспиновой частицы в центральном потенциале с единственным отличием, что «эффективный центральный потенциал» $V_{LSJ}(r)$ зависит от триплета (LSJ) [1].

---

[1]) Для $S = 0$ спин-орбитальные силы отсутствуют и при любых L и J имеем

$$V_{LOL} = V_1 - 3V_2.$$

Аналогично, если $S = 1$ и $L = J$, то «эффективный потенциал» не зависит от L

$$V_{LlL} = V_1 + V_2 - V_3.$$

В качестве последнего примера рассмотрим потенциал вида

$$V = V_C(r) + V_T(r)\, S_{12}.$$

Из-за присутствия «тензорных» сил гамильтониан не коммутирует с $\boldsymbol{L}^2$, но продолжает коммутировать с $\boldsymbol{S}^2$ и оператором «четности» P, введенным в § 23. Следовательно, собственные функции H можно искать среди общих собственных функций P, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_z, т. е. среди функций с определенными значениями полного момента (JM), четности и спина S.

Если $S = 0$, то обязательно $L = J$ (а значит $P = (-1)^J$) и собственная функция имеет вид $F(r)\,\mathcal{Y}^M_{J0J}$. Так как $\boldsymbol{S}|00\rangle = 0$, то из (102′) имеем

$$S_{12}\mathcal{Y}^M_{J0J} \equiv S_{12}Y^M_J(\theta, \varphi)|00\rangle = 0.$$

Следовательно, $F(r)$ удовлетворяет радиальному уравнению для частицы с моментом J в потенциале $V_C(r)$.

Если $S = 1$ и $P = (-1)^J$, то обязательно $L = J$ и «угловая зависимость» собственной функции, как и ранее, полностью определена

$$\Psi^M_{J1J} = F(r)\,\mathcal{Y}^M_{J1J}.$$

Можно показать (задача 11), что $S_{12}\mathcal{Y}^M_{J1J} = 2\mathcal{Y}^M_{J1J}$ и функция $F(r)$ удовлетворяет радиальному уравнению для частицы с моментом импульса J в потенциале $V_C(r) + 2V_T(r)$.

Если $S = 1$ и $P = (-1)^{J+1}$, то возможными значениями L будут только $J + 1$ и $J - 1$ (если же $J = 0$, то имеется только одно значение $L = 1$) и собственная функция имеет вид

$$\Psi \equiv F_{J-1}(r)\,\mathcal{Y}_- + F_{J+1}(r)\,\mathcal{Y}_+,$$

где для упрощения записи мы использовали обозначения $\mathcal{Y}_\pm \equiv \mathcal{Y}^M_{J\pm1\,J}$. Теперь S_{12}, действуя на $\mathcal{Y}_+$ или на $\mathcal{Y}_-$, дает комбинацию этих функций (задача 11), следовательно, выражение $(H - E)\Psi$ также будет линейной комбинацией этих функций с коэффициентами, зависящими от r. Как следствие уравнения $(H - E)\Psi = 0$, эти два коэффициента равны нулю, что приводит к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка для $F_{J-1}(r)$ и $F_{J+1}(r)$.

Выпишем в качестве примера систему связных радиальных уравнений для $J = 1$. Этот случай встречается при изучении дейтрона. Волновая функция является смесью состояний $^3S_1$ и $^3D_1$ и может быть представлена в виде

$$\Psi \equiv \frac{1}{r}u_S(r)\,\mathcal{Y}^M_{011} + \frac{1}{r}u_D(r)\,\mathcal{Y}^M_{211}.$$

Поскольку (задача 11)

$$\begin{aligned} &S_{12}\mathcal{Y}^M_{011} = \sqrt{8}\,\mathcal{Y}_{211}, \quad && S_{12}\mathcal{Y}^M_{211} = \sqrt{8}\,\mathcal{Y}^M_{011} - 2\mathcal{Y}^M_{211}, \\ &\boldsymbol{L}^2\mathcal{Y}^M_{011} = 0, && \boldsymbol{L}^2\mathcal{Y}^M_{211} = 6\mathcal{Y}^M_{211} \end{aligned} \tag{114}$$

и

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2 L^2}{M_0 r^2} + V_C(r) + V_T(r)\,S_{12},$$

уравнение $(H - E)\,\Psi = 0$ эквивалентно системе уравнений:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{d^2}{dr^2} + E - V_C(r)\right] u_S &= \sqrt{8}\,V_T(r)\,u_D, \\ \left[\frac{\hbar^2}{M_0}\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{6}{r^2}\right) + E + 2V_T(r) - V_C(r)\right] u_D &= \sqrt{8}\,V_T(r)\,u_S. \end{aligned} \tag{115}$$

§ 29. Сложение трех и более моментов импульса. Коэффициенты Рака. «3sj»-символы

Двухнуклонная система, рассмотренная в § 28, представляет собой пример системы, где полный момент импульса является суммой трех индивидуальных моментов (ур. (103)). Мы смогли разобрать этот простой пример без обращения к утонченным методам. Исследуем теперь сложение трех моментов в общем случае.

Предположим, что рассматриваемая система состоит из трех различных систем, 1, 2 и 3 с моментами импульса j_1, j_2 и j_3 соответственно. Полный момент импульса тогда равен

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 + \boldsymbol{j}_3.$$

Проблема сложения заключается в построении собственных векторов полного момента в подпространстве, натянутом на $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)$ собственных векторов

$$|\,\alpha j_1 j_2 j_3 m_1 m_2 m_3\rangle$$

отдельных моментов импульса, отвечающих определенным значениям квантовых чисел α, j_1, j_2 и j_3. Квантовое число α, определяемое здесь так же, как и в § 25, в последующем изложении несущественно и будет опускаться.

Существует несколько способов построения векторов с моментом импульса (JM):

(i) Можно связать $\boldsymbol{j}_1$ и $\boldsymbol{j}_2$ (рис. 4, *а*), образуя момент $\boldsymbol{J}_{12} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2$, а затем связать $\boldsymbol{J}_{12}$ и $\boldsymbol{j}_3$, образуя $\boldsymbol{J}$. Таким образом,

получаем собственные векторы

$$|(j_1j_2)J_{12},\ j_3;\ JM\rangle = \sum_{\substack{m_1m_2\\M_{12}m_3}} |j_1j_2j_3m_1m_2m_3\rangle\langle j_1j_2m_1m_2|J_{12}M_{12}\rangle\langle J_{12}j_3M_{12}m_3|JM\rangle, \quad (116)$$

общие для операторов $\boldsymbol{j}_1^2$, $\boldsymbol{j}_2^2$, $\boldsymbol{j}_3^2$, $\boldsymbol{J}_{12}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z.

(ii) Можно связать $\boldsymbol{j}_2$ и $\boldsymbol{j}_3$ (рис. 4, *б*), образуя момент $\boldsymbol{J}_{23} = \boldsymbol{j}_2 + \boldsymbol{j}_3$, а затем связать $\boldsymbol{j}_1$ и $\boldsymbol{J}_{23}$, образуя $\boldsymbol{J}$. Таким образом, получаем собственные векторы

$$|j_1,\ (j_2j_3)J_{23};\ JM\rangle = \sum_{\substack{m_2m_3\\m_1M_{23}}} |j_1j_2j_3m_1m_2m_3\rangle\langle j_2j_3m_2m_3|J_{23}M_{23}\rangle\langle j_1J_{23}m_1M_{23}|JM\rangle, \quad (117)$$

общие для операторов $\boldsymbol{j}_1^2$, $\boldsymbol{j}_2^2$, $\boldsymbol{j}_3^2$, $\boldsymbol{J}_{23}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z.

(iii) Можно связать $\boldsymbol{j}_1$ и $\boldsymbol{j}_3$, образуя $\boldsymbol{J}_{13}$, а затем и $\boldsymbol{j}_2$, образуя $\boldsymbol{J}$.

Итак, у нас имеется выбор между тремя различными наборами базисных векторов полного момента. В большинстве задач



а) $\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 = \boldsymbol{J}_{12}$, $\boldsymbol{J}_{12} + \boldsymbol{j}_3 = \boldsymbol{J}$ *б)* $\boldsymbol{j}_2 + \boldsymbol{j}_3 = \boldsymbol{J}_{23}$, $\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{J}_{23} = \boldsymbol{J}$

Рис. 4. Способы сложения трех моментов импульса.

важно уметь переходить от одного базиса к другому. Преобразование, которое осуществляет этот переход, является унитарным. Например, имеем

$$|j_1,\ (j_2j_3)J_{23};\ JM\rangle = \sum_{J_{12}} |(j_1j_2)J_{12},\ j_3;\ JM\rangle\langle(j_1j_2)J_{12},\ j_3J|j_1,\ (j_2j_3)J_{23}J\rangle. \quad (118)$$

Очевидно, коэффициенты этого унитарного преобразования не зависят от α по тем же самым причинам, что и коэффициенты К. — Г. Действуя операторами J_+ или J_- на обе части (118), легко видеть, что они не зависят также от M, а зависят только от шести моментов: j_1, j_2, j_3, J_{12}, J_{23} и J.

Вместо непосредственного использования этих коэффициентов более удобно использовать коэффициенты Рака W, или

«6j»-символы Вигнера, которые пропорциональны им в соответствии с определениями

$$\langle (j_1 j_2) J_{12},\ j_3 J \mid j_1,\ (j_2 j_3) J_{23} J\rangle =$$
$$= \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}\ W(j_1 j_2 J j_3;\ J_{12} J_{23}) =$$
$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix}.$$

Из определения W ясно, что эти коэффициенты являются суммами по индексам m четырех коэффициентов К. — Г. Исключая случай наиболее простых аргументов, непосредственное вычисление коэффициентов W чрезвычайно затруднительно; оно заключается в вычислении большого числа коэффициентов К. — Г., а затем в вычислении сложного выражения, построенного из этих коэффициентов. Рака удалось получить обозримое и приемлемое для работы выражение для W (формула (В.36)). Существуют таблицы коэффициентов W для наиболее часто встречающихся аргументов.

«6j»-символы отличаются от W только знаком. Они интересны в основном благодаря их замечательным свойствам симметрии. Основные свойства коэффициентов W и «6j»-символов приведены в Дополнении В (раздел II).

Рассмотренный выше способ сложения трех моментов импульса может быть перенесен и на случай сложения большего числа моментов

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 + \ \dots\ + \boldsymbol{j}_n. \tag{119}$$

Складывая два любых момента: $\boldsymbol{j}_i + \boldsymbol{j}_k = \boldsymbol{J}_{ik}$, мы сводим задачу к сложению $(n-1)$ момента, заменяя векторы $\boldsymbol{j}_i$ и $\boldsymbol{j}_k$ в правой части (119) их суммой $\boldsymbol{J}_{ik}$. Повторяя эту операцию, приходим к сложению $(n-2)$ моментов и т. д. Таким образом, нам удается сложить n угловых моментов, вводя $(n-2)$ промежуточных момента. Так же строится и система базисных векторов полного момента импульса.

Выбирая различные промежуточные моменты, можно построить несколько различных наборов базисных векторов. Мы видели, что при $n=3$ существует три набора. Можно показать, что в общем случае существует $^1/_2 n!$ наборов. Переход от одного набора к другому осуществляется посредством унитарного преобразования (с вещественными коэффициентами). Легко убедиться в том, что коэффициенты преобразования не зависят от α и от M — собственного значения компоненты J_z оператора $\boldsymbol{J}$, а зависят только от квантовых чисел J, j_1, j_2, ..., j_n и двух наборов из $(n-2)$ квантовых чисел, таких как J_{ik}, которые определяют длину промежуточных моментов, характеризующих каждый набор базисных векторов: всего $1+n+2(n-2)=3(n-1)$

квантовых чисел j. Коэффициенты преобразования можно представить в форме «$3(n-1)j$»-символов, обобщающих «$6j$»-символы, введенные при сложении трех моментов, «$3(n-1)j$»-символы являются суммами $2(n-1)$ коэффициентов К.—Г. по индексам m. Основные свойства «$9j$»-символов (символы для сложения четырех моментов) приведены в Дополнении В (раздел III).

Раздел VI. НЕПРИВОДИМЫЕ ТЕНЗОРНЫЕ ОПЕРАТОРЫ [1])

§ 30. Представление скалярных операторов

Если наблюдаемая инвариантна относительно вращений, то и подпространство, соответствующее каждому из ее собственных значений, инвариантно. Это важное свойство уже упоминалось в § 17. Там в качестве наблюдаемой рассматривался гамильтониан, но это свойство справедливо и для любой другой скалярной наблюдаемой.

В более общем случае, скалярная наблюдаемая, даже не будучи диагональной, в данном стандартном представлении задается, как мы увидим ниже, особенно простой матрицей.

Пусть $|\tau JM\rangle$ — базисные векторы стандартного представления $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ (обозначения § 6), а S — скалярный оператор (не обязательно наблюдаемая). По предположению,

$$[\boldsymbol{J}, S]=0.$$

Отсюда следует, что вектор $S|\tau' J'M'\rangle$, так же как $|\tau' J'M'\rangle$, является вектором с моментом импульса $(J'M')$ и ортогонален к любому вектору с другим моментом. Следовательно, матричный элемент $\langle \tau JM|S|\tau' J'M'\rangle$ равен нулю, если $J\neq J'$ или $M\neq M'$. Более того, поскольку J_+ коммутирует с S, то при $J=J'$ и $M=M'$ имеем

$$\begin{aligned}\langle \tau JM\,|S\,|\tau' JM\rangle=&\\ &=[J(J+1)-M(M-1)]^{-\frac{1}{2}}\langle \tau JM\,|SJ_+\,|\tau' JM-1\rangle=\\ &=[J(J+1)-M(M-1)]^{-\frac{1}{2}}\langle \tau JM|\,J_+S\,|\tau' JM-1\rangle=\\ &=\langle \tau JM-1\,|S\,|\tau' JM-1\rangle,\end{aligned}$$

---

[1]) Систематическое изложение алгебры неприводимых тензоров и ее приложений в теории момента импульса в квантовой механике содержится в книге: *U. Fano, G. Racah.* Irreducible tensorial sets. N. Y., Academic Press Inc. (1959).

и, значит, матричный элемент не зависит от M. Полученные свойства можно записать в виде равенства

$$\langle \tau JM \,|\, S \,|\, \tau' J' M' \rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} S^{(J)}_{\tau\tau'}, \tag{120}$$

где $S^{(J)}_{\tau\tau'}$ — величина, зависящая только от J, τ и τ'. В случае, когда S — наблюдаемая, матрица $S^{(J)}_{\tau\tau'}$ эрмитова и ее можно привести к диагональному виду.

§ 31. Неприводимые тензорные операторы. Определение

В этом параграфе мы обобщим равенство (120) на класс операторов, которые называются неприводимыми тензорными операторами. Они не инвариантны относительно вращений, но закон преобразования их при вращениях довольно простой.

Понятие тензорного оператора является обобщением понятия векторного оператора.

Начнем с определения *тензора*. Допустим, что нам дано n-мерное пространство $\mathscr{E}_n$ такое, что при вращении векторы из $\mathscr{E}_n$ линейно преобразуются в векторы из $\mathscr{E}_n$: с каждым вращением связан линейный оператор в $\mathscr{E}_n$. По определению, векторы $\mathscr{E}_n$ являются n-компонентными тензорами. Например, векторы в обычном пространстве и спиноры являются 3- и 2-компонентными тензорами соответственно; векторы из определенного в § 6 подпространства $\mathscr{E}(\tau J)$ являются $(2J+1)$-компонентными тензорами, а кет-векторы пространства состояний квантовой системы — тензорами с бесконечным числом компонент.

Если выбрать набор базисных векторов в $\mathscr{E}_n$, то каждый из упомянутых выше тензоров будет задаваться n компонентами, а вращение — действием матрицы $n \times n$ на эти n компонент. Так, вращение вектора, заданного декартовыми координатами в обычном пространстве, осуществляется матрицей $\mathscr{R}$, определенной в § 10. Аналогично, если мы возьмем стандартное представление в $\mathscr{E}(\tau J)$, то любой тензор $|u\rangle$ подпространства $\mathscr{E}(\tau J)$ определяется $(2J+1)$ компонентами $u_M \equiv \langle \tau JM | u \rangle$, а компоненты u'_M его преобразования при вращении $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ получаются применением к u_M матрицы вращения $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$ (§ 16)

$$u'_M = \sum_{M'} R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma)\, u_{M'}. \tag{121}$$

В качестве другого примера рассмотрим девять величин $V_i W_j$ ($i, j = 1, 2, 3$), получающихся перемножением различных компонент векторов $\boldsymbol{V}$ и $\boldsymbol{W}$. Они представляют собой девять компонент тензора, который мы обозначим $\boldsymbol{V} \otimes \boldsymbol{W}$. Компоненты этого тензора после вращения $\mathscr{R}$ получаются следующим образом:

$$[\boldsymbol{V} \otimes \boldsymbol{W}]'_{ij} \equiv V'_i W'_j = \mathscr{R}_{ik}\mathscr{R}_{jl} V_k V_l = \mathscr{R}_{ik}\mathscr{R}_{jl}\,[\boldsymbol{V} \otimes \boldsymbol{W}]_{kl}.$$

Среди множества тензоров, которые можно построить, привилегированное положение занимают *неприводимые тензоры*. По определению, тензор является неприводимым, если пространство $\mathscr{E}_n$, которому он принадлежит, неприводимо по отношению к вращениям.

Векторы обычного пространства, спиноры, векторы пространства $\mathscr{E}(\tau J)$ являются неприводимыми тензорами.

С другой стороны, тензор $\boldsymbol{V} \otimes \boldsymbol{W}$ — приводимый. Девятимерное пространство, в котором он определен, является прямой суммой трех неприводимых ин-

вариантных по отношению к вращениям подпространств, имеющих размерности 1, 3 и 5 соответственно. Следовательно, проекции тензора $\boldsymbol{V} \otimes \boldsymbol{W}$ на каждое из этих подпространства дают неприводимые тензоры; с точностью до константы они представляют собой: скалярное произведение $\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{W}$, векторное произведение $\boldsymbol{V} \times \boldsymbol{W}$ и неприводимый 5-компонентный тензор, компоненты которого преобразуются при вращениях как гармонические полиномы второго порядка (см. § Б. 10) [1].

Точно так же векторы $(2j_1+1)(2j_2+1)$-мерного пространства из § 25 являются приводимыми тензорами с $(2j_1+1)(2j_2+1)$ компонентами, и теорема сложения дает их разбиение на неприводимые.

От понятия тензора переходят к понятию тензорного оператора точно так же, как от понятия вектора к векторному оператору.

Если n операторов преобразуются при вращениях линейно друг через друга, как n линейно независимых векторов пространства $\mathscr{E}_n$, то они являются компонентами n-мерного *тензорного оператора* [2]. Линейное преобразование этих n компонент даст n новых операторов, которые можно рассматривать как компоненты того же тензорного оператора в другом представлении. Если пространство $\mathscr{E}_n$ неприводимо, то и *тензорный оператор* называют *неприводимым*.

Векторные операторы образуют специальный класс неприводимых тензорных операторов.

Если $\boldsymbol{V}$ и $\boldsymbol{W}$ — два векторных оператора, то девять операторов $V_i W_j$ являются компонентами приводимого тензорного оператора, который может быть представлен в виде прямой суммы трех неприводимых тензорных операторов: скаляра $\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{W}$, вектора $\boldsymbol{V} \times \boldsymbol{W}$ и тензорного оператора, который задается, например, пятью компонентами, приведенными в предыдущем примечании.

Тензорный оператор в заданном представлении однозначно определен законом преобразования его компонент при вращении.

По определению, $(2k+1)$ *операторов* $T_q^{(k)}$ $(q = -k, -k+1, \ldots, +k)$ *являются стандартными компонентами неприводимого тензорного оператора* k*-го* порядка $T^{(k)}$, *если они преобразуются при вращениях по закону*

$$RT_q^{(k)}R^{-1} = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} R_{q'q}^{(k)}. \tag{122}$$

Данный закон совпадает с законом преобразования базисных векторов $|kq\rangle$ стандартного представления для $(2k+1)$-

[1]) Матрицы вращения, конечно, зависят от выбранного для этого тензора представления. В представлении, где его компоненты равны

$$\frac{1}{2}(V_1W_2 + V_2W_1), \quad \frac{1}{2}(V_2W_3 + V_3W_2), \quad \frac{1}{2}(V_3W_1 + V_1W_3),$$

$$V_1W_1 - V_2W_2, \quad 2V_3W_3 - V_1W_1 - V_2W_2,$$

они преобразуются друг через друга как линейно независимые полиномы xy, yz, zx, $x^2 - y^2$, $2z^2 - x^2 - y^2$.

[2]) Этот закон преобразования не совпадает с законом преобразования векторов пространства $\mathscr{E}_n$, разложенных по n векторам базиса. Точно так же закон преобразования (54) компонент векторного оператора $\boldsymbol{K}$ не совпадает с законом (43) преобразования компонент вектора $\boldsymbol{V}$ в том же базисе. Отметим, в частности, различие в формулах (122) и (121).

мерного пространства, неприводимого по отношению к вращениям

$$R\,|\,kq\rangle = \sum_{q'} |\,kq'\rangle\, R^{(k)}_{q'q}.$$

Если равенство (122) выполнено для бесконечно малых вращений, то оно будет выполнено и для всех остальных вращений. Для бесконечно малых вращений оператор R определяется формулой (55), матрицы $R^{(k)}$ легко получаются из определения (64), и закон (122) в этом случае эквивалентен следующим коммутационным соотношениям операторов $T^{(k)}_q$ с компонентами полного момента импульса:

$$[J_\pm,\ T^{(k)}_q] = \sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}\, T^{(k)}_{q\pm 1}, \tag{123а}$$

$$[J_z,\ T^{(k)}_q] = qT^{(k)}_q. \tag{123б}$$

Соотношения (123), которые можно сравнить с (23)—(25), позволяют дать другое определение неприводимого тензорного оператора $T^{(k)}$ (полностью эквивалентное приведенному выше).

Если операторы $T^{(k)}_q$ соответствуют физическим величинам, то они инвариантны относительно поворота на 2π (ср. § 15) и, следовательно, k — *целое число*. В дальнейшем мы будем рассматривать только неприводимые тензорные операторы целого порядка.

Легко показать, что $(2k+1)$ операторов

$$S^{(k)}_q \equiv (-1)^q T^{(k)\dagger}_{-q}$$

удовлетворяют соотношениям (123) (задача 16), и, следовательно, являются стандартными компонентами неприводимого тензорного оператора $\boldsymbol{S}^{(k)}$ порядка k. По определению, операторы $\boldsymbol{S}^{(k)}$ и $\boldsymbol{T}^{(k)}$ *эрмитово сопряжены друг другу*

$$\boldsymbol{S}^{(k)} = \boldsymbol{T}^{(k)\dagger}$$

(поскольку k — целое, ясно, что операция эрмитова сопряжения обратима).

Скаляры являются неприводимыми тензорными операторами нулевого порядка. Векторные операторы — неприводимыми тензорными операторами порядка 1: если K_x, K_y, K_z — декартовы компоненты векторного оператора, то его стандартными компонентами будут

$$K^{(1)}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(K_x + iK_y), \quad K^{(1)}_0 = K_z, \quad K^{(1)}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(K_x - iK_y). \tag{124}$$

(Отметим, что фигурирующие здесь коэффициенты отличны от встречающихся в соотношениях (94).)

Сферические функции $Y_k^q(\theta, \varphi)$ $(q = -k, \ldots, +k)$, рассматриваемые как операторы, представляют собой стандартные компоненты неприводимого тензорного оператора $\mathbf{Y}^{(k)}$ порядка k.

§ 32. Представление неприводимых тензорных операторов. Теорема Вигнера — Эккарта

Наиболее важное свойство неприводимых тензорных операторов отражено в теореме Вигнера — Эккарта:

В стандартном представлении $\{\mathbf{J}^2 J_z\}$, базисные векторы которого обозначим $|\tau JM\rangle$, матричный элемент $\langle \tau JM | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$ q-й стандартной компоненты данного неприводимого тензорного оператора k-го порядка, $T^{(k)}$ равен произведению коэффициента Клебша — Гордана

$$\langle J' k M' q \,|\, JM \rangle$$

на величину, не зависящую от M, M' и q.

Таким образом, справедлива формула

$$\langle \tau JM \,|\, T_q^{(k)} \,|\, \tau' J' M' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \langle \tau J \,\|\, T^{(k)} \,\|\, \tau' J' \rangle \langle J' k M' q \,|\, JM \rangle, \quad (125)$$

где величина $\langle \tau J \| T^{(k)} \| \tau' J' \rangle$, которая называется *приведенным матричным элементом*, зависит от индексов τ, J и τ', J' и характеризует данный тензорный оператор (множитель $1/\sqrt{2J+1}$ введен для удобства).

Для доказательства теоремы рассмотрим $(2k+1)(2J'+1)$ векторов $T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$ $(q = -k, \ldots, +k;\ M' = -J', \ldots, +J')$. Образуем следующие линейные комбинации этих векторов:

$$| \sigma J'' M'' \rangle = \sum_{M' q} T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle \langle J' k M' q \,|\, J'' M'' \rangle.$$

Используя соотношения ортогональности для коэффициентов К. — Г. (ур. (110б)), получаем

$$T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle = \sum_{J'' M''} | \sigma J'' M'' \rangle \langle J' k M' q \,|\, J'' M'' \rangle. \quad (126)$$

Отметим, что векторы $T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$ могут и не быть линейно независимыми, поэтому некоторые из векторов $|\sigma J'' M''\rangle$ могут обратиться в нуль.

Из формул (123а) и (124) вытекает, что

$$J_+ T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle = [J_+, T_q^{(k)}] | \tau' J' M' \rangle + T_q^{(k)} J_+ | \tau' J' M' \rangle =$$
$$= \sqrt{k(k+1) - q(q+1)}\, T_{q+1}^{(k)} | \tau' J' M' \rangle +$$
$$+ \sqrt{J'(J'+1) - M'(M+1)}\, T_q^{(k)} | \tau' J' M' + 1 \rangle,$$

и, следовательно,

$$J_+|\sigma J''M''\rangle =$$
$$= \sum_{M'q} T_q^{(k)}|\tau' J'M'\rangle \{\sqrt{k(k+1)-q(q-1)}\,\langle J'kM'q-1|J''M''\rangle +$$
$$+\sqrt{J'(J'+1)-M'(M'-1)}\,\langle J'kM'-1q|J''M''\rangle\}.$$

В силу рекуррентных соотношений (111) для коэффициентов К. — Г. выражение, стоящее в скобках, равно

$$\sqrt{J''(J''+1)-M''(M''+1)}\,\langle J'kM'q|J''M''+1\rangle,$$

и мы получаем в правой части вектор $|\sigma J''M''+1\rangle$ или, более точно,

$$J_+|\sigma J''M''\rangle = \sqrt{J''(J''+1)-M''(M''+1)}\,|\sigma J''M''+1\rangle.$$

Тем же методом можно показать, что

$$J_-|\sigma J''M''\rangle = \sqrt{J''(J''+1)-M''(M''-1)}\,|\sigma J''M-1\rangle$$
$$J_z|\sigma J''M''\rangle = M''\,|\sigma J''M''\rangle.$$

Из этих трех соотношений следует, что $(2J''+1)$ векторов $|\sigma J''M''\rangle$, соответствующих одному и тому же значению J'':

(i) либо все равны нулю;

(ii) либо являются (ненормированными) собственными векторами с моментом импульса $(J''M'')$ и получаются один из другого стандартным способом.

Следовательно, все скалярные произведения $\langle\tau JM|\sigma J''M''\rangle$ обращаются в нуль за исключением тех, для которых $J''=J$ и $M''=M$, т. е. $(2J+1)$ произведений $\langle\tau JM|\sigma JM\rangle$, причем они не зависят от M.

Отсюда следует приведенная выше теорема, поскольку матричный элемент $\langle\tau JM|T_q^{(k)}|\tau' J'M'\rangle$ с учетом (126) равен

$$\langle\tau JM|T_q^{(k)}|\tau' J'M'\rangle = \sum_{J''M''}\langle\tau JM|\sigma J''M''\rangle\,\langle J'kM'q|J''M''\rangle. \quad \blacksquare$$

Среди наиболее важных следствий теоремы Вигнера — Эккарта упомянем правила отбора для оператора $T_q^{(k)}$.

Для того, чтобы матричный элемент $\langle\tau JM|T_q^{(k)}|\tau' J'M'\rangle$ *был отличен от нуля, необходимо одновременное выполнение соотношений*:

$$q = M - M', \tag{127}$$
$$|J-J'| \leqslant k \leqslant J+J'. \tag{128}$$

Эти соотношения непосредственно следуют из того факта, что в правой части формулы (125) стоит коэффициент Клеб-

ша — Гордана. На практике чаще используется второе из этих соотношений. Оно обычно формулируется в виде следствия [1]).

Матричный элемент компоненты $A^{(k)}$ неприводимого тензорного оператора порядка k между двумя векторами с моментами J, J' обращается в нуль, если k не удовлетворяет неравенствам: $|J - J'| \leqslant k \leqslant J + J'$.

§ 33. Приложения

Теорема Вигнера — Эккарта имеет много приложений в атомной и ядерной физике, а именно: в теории β-распада, электромагнитного излучения и, вообще, в задачах об угловых корреляциях.

Рассмотрим, например, электромагнитное излучение атомного ядра (γ-излучение). Предположим, что при переходе из возбужденного состояния $\mathcal{N}^*$ в основное $\mathcal{N}$ ядро испустило γ-квант

$$\mathcal{N}^* \to \mathcal{N} + \gamma.$$

Пусть J и J' обозначают спины (т. е. полный момент импульса) ядер $\mathcal{N}$ и $\mathcal{N}^*$ соответственно. В теории γ-излучения известно, что *амплитуда* вероятности излучения γ-кванта поляризации ν в направлении $\Omega = (\theta, \varphi)$ пропорциональна матричному элементу

$$\langle \tau J M \,|\, H(\Omega, \nu) \,|\, \tau' J' M' \rangle$$

некоторого оператора $H(\Omega, \nu)$ между векторами начального и конечного состояний (см. § XXI. 31). Оператор $H(\Omega, \nu)$ можно разложить по сферическим функциям. Не вдаваясь в детали [2]) заметим только, что тогда он принимает вид суммы неприводимых тензорных операторов двух типов (противоположной четности): электрических и магнитных мультипольных моментов. Электрический 2^l-польный момент $\boldsymbol{Q}^{(l)}$ является неприводимым тензорным оператором порядка l и четности $(-1)^l$; магнитный 2^l-польный момент $\boldsymbol{M}^{(l)}$ — неприводимым тензорным оператором порядка l и четности $(-1)^{l+1}$. Среди мультипольных моментов наиболее известны следующие:

(i) магнитный момент (в обычном смысле этого слова), т. е. дипольный магнитный момент $\boldsymbol{M}^{(1)}$;

(ii) квадрупольный момент (в обычном смысле этого слова), т. е. электрический квадрупольный момент $\boldsymbol{Q}^{(2)}$.

---

[1]) Компонента $A^{(k)}$ не обязательно стандартная; любые линейные комбинации стандартных компонент обладают этим свойством.

[2]) См. *Дж. Блатт, В. Вайскопф.* Теоретическая ядерная физика. М., ИЛ, 1954 (гл. XII и Дополнение Б).

В соответствии с правилами отбора для тензорных операторов, ненулевые вклады дают только моменты с мультипольностью l в пределах

$$|J-J'|\leqslant l\leqslant J+J' \tag{129}$$

(существует также правило отбора по четности, которое мы здесь не рассматриваем). В силу теоремы Вигнера — Эккарта, вклады компонент $Q_m^{(l)}$ моментов, удовлетворяющих неравенствам (129), пропорциональны коэффициенту Клебша — Гордана $\langle J'lM'm|JM\rangle$; для их вычисления достаточно определить коэффициент пропорциональности, т. е. приведенный матричный элемент $\langle \tau J\|\boldsymbol{Q}^{(l)}\|\tau' J'\rangle$.

Итак, вероятность перехода полностью известна, как только определены приведенные матричные элементы мультипольных моментов, удовлетворяющих правилам отбора. На практике, разложение в ряд по мультиполям сходится быстро и основной вклад дают один или два мультиполя низшего порядка.

Четные мультипольные моменты ($\boldsymbol{M}^{(1)}$, $\boldsymbol{Q}^{(2)}$, ...) появляются также при вычислении сдвигов энергетических уровней атомов или ядер в статическом электромагнитном поле. Так, взаимодействие ядра с постоянным магнитным полем позволяет измерить его магнитный момент, а взаимодействие с неоднородным электрическим полем — его квадрупольный момент. Действительно, при измерении получают среднее значение этих операторов в рассматриваемом состоянии ядра, т. е. матричные элементы

$$\langle \tau JM|M_m^{(1)}|\tau JM'\rangle,\quad \langle \tau JM|Q_m^{(2)}|\tau JM'\rangle$$

или приведенные диагональные матричные элементы

$$\langle \tau J\|\boldsymbol{M}^{(1)}\|\tau J\rangle,\quad \langle \tau J\|\boldsymbol{Q}^{(2)}\|\tau J\rangle.$$

Отметим, что магнитный момент обращается в нуль при $J_l=0$, а квадрупольный момент — при $J=0$ или $^1/_2$. Вообще, 2^l-польный момент ядра со спином J равен нулю при $2J<l$.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Исходя из соотношений (24) и (25) между векторами

$$|\tau j\mu\rangle\quad(\mu=-j,\ -j+1,\ \ldots,\ +j),$$

доказать соотношения (26) и (27).

2. Доказать, что в любом представлении, где J_x и J_z — вещественные (а значит и симметричные) матрицы, J_y будет чисто мнимой (а значит и антисимметричной) матрицей.

[*N. B.* Стандартное представление попадает в эту категорию.]

3. Доказать, что для коммутативности оператора со всеми компонентами момента импульса достаточно, чтобы он коммутировал с двумя его компонентами.

4. Пусть $\boldsymbol{l}$ — орбитальный момент частицы, θ и φ — полярные углы и P — «оператор четности». Оператор P соответствует отражению в начале координат, его действие на функцию $F(\theta, \varphi)$ определено равенством: $PF(\theta, \varphi) = F(\pi - \theta, \varphi + \pi)$. Показать, что $[P, \boldsymbol{l}] = 0$. Вывести отсюда, что сферические функции обладают определенной зависящей от квантового числа l четностью, и найти ее.

5. Пусть $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{r}'$ — два вектора в обычном пространстве, $\Omega \equiv (\theta, \varphi)$ и $\Omega' \equiv (\theta', \varphi')$ — их полярные углы, $\boldsymbol{l}$, $\boldsymbol{l}'$ — соответствующие операторы моментов импульса; пусть α $(0 \leqslant \alpha \leqslant \pi)$ — угол между векторами: $\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{r}' = r \cdot r' \cos \alpha$. Полином Лежандра $P_l(\cos \alpha)$ является функцией полярных углов векторов $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$. Показать, что он удовлетворяет уравнениям в частных производных

$$\boldsymbol{l}^2 P_l(\cos \alpha) = \boldsymbol{l}'^2 P_l(\cos \alpha) = l(l+1) P_l(\cos \alpha),$$

$$\left(l_i + l_i'\right) P_l(\cos \alpha) = 0 \qquad (i = x, y, z).$$

Вывести отсюда теорему сложения:

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \alpha) \equiv Y_l^0(\alpha)\, Y_l^0(0) = \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m Y_l^m(\Omega)\, Y_l^{-m}(\Omega').$$

6. Пусть $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{w}$ — три единичных вектора, образующих правую декартову систему. Показать, что бесконечно малое вращение

$$\hat{\mathcal{R}} \equiv \mathcal{R}_v^{-1}(\varepsilon)\, \mathcal{R}_u^{-1}(\varepsilon)\, \mathcal{R}_v(\varepsilon)\, \mathcal{R}_u(\varepsilon)$$

(обозначения раздела III) отличается от $\mathcal{R}_w(-\varepsilon^2)$ только членами порядка выше ε^2. Используя формулу (58), вычислить оператор бесконечно малого вращения $\hat{R}$ вплоть до членов порядка ε^2 и проверить соотношения коммутации $[J_u, J_v] = iJ_w$.

7. Используя коммутационные соотношения (56), показать, что скалярное произведение двух векторных операторов $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{AB} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$ коммутирует с компонентами полного момента импульса.

8. Показать, что

$$\exp(-i\beta J_y) = \exp\left(\frac{1}{2} i\pi J_x\right) \exp(-i\beta J_z) \exp\left(-\frac{1}{2} i\pi J_x\right).$$

Вывести отсюда, что матричные элементы $\langle JM|\exp(-i\beta J_y)|JM'\rangle$ являются полиномами степени $2J$ по переменным $\sin\frac{1}{2}\beta$ и $\cos\frac{1}{2}\beta$.

9. Доказать тождество $(\sigma \boldsymbol{A})(\sigma \boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{AB}) + i\sigma(\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})$ $(\sigma \equiv (\sigma_x \sigma_y \sigma_z)$ — матрицы Паули, $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ — векторные операторы, коммутирующие с σ, но не обязательно друг с другом).

10. Пусть s — внутренний момент частицы спина 1 $(s^2 = s(s+1) = 2)$.

(i) Показать, что для любой компоненты $s_u \equiv (su)$ имеем

$$s_u^3 = s_u, \quad \exp(-i\varphi s_u) = 1 - i \sin \varphi s_u - (1 - \cos \varphi) s_u^2,$$

и получить явное выражение для матрицы вращений $R^{(1)}(\alpha\beta\gamma)$.

(ii) Пусть $|z\rangle$ — нормированный вектор такой, что $s_z|z\rangle = 0$, а $|x\rangle$ и $|y\rangle$ — векторы, получающиеся из него вращением на $+{}^1/_2\pi$ вокруг Oy и на $-{}^1/_2\pi$ вокруг Ox соответственно. Доказать следующие соотношения и соотношения, получающиеся из них циклической перестановкой x, y и z:

$$s_x|x\rangle = 0, \quad s_x|y\rangle = i|z\rangle, \quad s_x^2|y\rangle = |y\rangle,$$

$$s_x|z\rangle = -i|y\rangle, \quad s_x^2|z\rangle = |z\rangle.$$

Используя эти соотношения, показать, что $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ образуют ортонормированный базис, а матрицы, которые задают s_x, s_y и s_z в этом базисе, совпадают с приведенными в § 21.

(iii) Показать, что $\langle i|R(\alpha\beta\gamma)|j\rangle = \mathscr{R}_{ij}(\alpha\beta\gamma)$ ($i, j = x, y$ или z) (обозначения § 10 и § 14).

11. Пусть $\boldsymbol{S}$ — полный спин системы двух нуклонов. Показать, что оператор $Q \equiv (\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2/r^2$ — проектор. Показать, что «тензорный» оператор $S_{12} \equiv 2[3Q - \boldsymbol{S}^2]$ удовлетворяет тождеству: $S_{12}^2 = 4\boldsymbol{S}^2 - 2S_{12}$, и возможные его собственные значения равны 0, 2 и —4. Определить действие операторов Q и S_{12} на введенные в § 28 функции от угловых переменных и спинов $\mathscr{Y}^M_{LSJ}$.

(Если принять сокращенные обозначения

$$\mathscr{Y}^{(0)} \equiv \mathscr{Y}^M_{J0J}, \quad \mathscr{Y}^{(1)}_0 \equiv \mathscr{Y}^M_{J1J}, \quad \mathscr{Y}^{(1)}_\pm \equiv \mathscr{Y}^M_{J\pm 1 1J},$$

то получим

$$Q\mathscr{Y}^{(0)} = 0, \qquad (2J+1)\,Q\mathscr{Y}^{(1)}_+ = J\mathscr{Y}^{(1)}_+ + \sqrt{J(J+1)}\,\mathscr{Y}^{(1)}_-,$$

$$Q\mathscr{Y}^{(1)}_0 = \mathscr{Y}^{(1)}_0, \quad (2J+1)\,Q\mathscr{Y}^{(1)}_- = \sqrt{J(J+1)}\,\mathscr{Y}^{(1)}_+ + (J+1)\,\mathscr{Y}^{(1)}_-.)$$

12. Рассмотрим частицу спина $1/2$. Показать, что в пространстве состояний с данным орбитальным моментом l операторы

$$\frac{l+1+\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2l+1} \quad \text{и} \quad \frac{l-\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2l+1}$$

являются проекторами на состояния с полным моментом импульса $j = l + \frac{1}{2}$ и $j = l - \frac{1}{2}$ соответственно.

13. Сложим два равных момента $j_1 = j_2 = j$. Не используя свойств симметрии коэффициентов К. — Г., показать, что при перестановке m_1 и m_2 собственные функции полного момента симметричны (инвариантны) или антисимметричны (умножаются на —1), и характер симметрии зависит только от J. Показать, что они симметричны или антисимметричны в зависимости от того $(-1)^{2j+J}$ равно $+1$ или -1.

14. Обозначим через $\boldsymbol{J}^2\{A\}$ следующую функцию оператора A и компонент момента импульса:

$$\boldsymbol{J}^2\{A\} \equiv [J_x, [J_x, A]] + [J_y, [J_y, A]] + [J_z, [J_z, A]].$$

Показать, что если $\boldsymbol{T}^{(k)}$ — неприводимый тензорный оператор k-го порядка, то его компоненты удовлетворяют соотношению

$$\boldsymbol{J}^2\{T^{(k)}_q\} = k(k+1)\,T^{(k)}_q.$$

15. Пусть a_r, $a_r^\dagger$ ($r = 1, 2$) — операторы рождения и уничтожения двумерного изотропного гармонического осциллятора:

$$[a_r, a_s] = [a_r^\dagger, a_s^\dagger] = 0, \quad [a_r, a_s^\dagger] = \delta_{rs}.$$

Обозначим

$$S = \frac{1}{2}[a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2],$$

$$J_1 = \frac{1}{2}[a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2], \quad J_2 = \frac{1}{2}i[a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2], \quad J_3 = \frac{1}{2}[a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2].$$

Тогда J_1, J_2, J_3 можно рассматривать как декартовы координаты некоторого векторного оператора $\boldsymbol{J}$ [*N. B.* в обозначениях § XII. 14, $L = 2J_2$].

(i) Показать, что компоненты $\boldsymbol{J}$ удовлетворяют соотношениям коммутации $\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{J} = i\boldsymbol{J}$, характеризующим момент импульса, и справедливо равенство

$$\boldsymbol{J}^2 = S(S+1) \quad \text{(следовательно, } [S, \boldsymbol{J}] = 0\text{)}.$$

(ii) Будем рассматривать $\boldsymbol{J}$ как оператор момента импульса системы и обозначим $j(j+1)$ и m — собственные значения $\boldsymbol{J}^2$ и J_3 соответственно. Показать, что $\boldsymbol{J}^2$ и J_3 образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, а j может принимать все целые и полуцелые значения $\geqslant 0$. т. е.

$$j = 0, \quad \frac{1}{2}, \quad 1, \quad \frac{3}{2}, \quad 2, \ldots, \infty.$$

Показать, что векторы $[(j+m)!\,(j-m)!]^{-\frac{1}{2}}\, a_1^{\dagger j+m} a_2^{\dagger j-m} |0\rangle$ образуют базис стандартного представления $\{\boldsymbol{J}^2 J_3\}$.

(iii) Показать, что $a_1^\dagger$ и $a_2^\dagger$ являются соответственно $+1/2$ и $-1/2$ компонентами неприводимого тензорного оператора порядка $1/2$ и, как следствие, выражения $Ra_r^\dagger R^{-1}$ $(r = 1, 2)$, где R означает оператор вращения

$$R = \exp(-i\alpha J_3) \exp(-i\beta J_2) \exp(-i\gamma J_3),$$

являются линейными комбинациями $a_1^\dagger$ и $a_2^\dagger$. Определить коэффициенты в этих выражениях.

(iv) Используя предыдущие результаты, доказать формулу Вигнера (B. 72) и основные свойства матриц $R^{(j)}$, приведенные в Дополнении B (за исключением формул композиции и приведения).

16. Показать, что если $(2k+1)$ операторов $T_q^{(k)}$ $(q = -k, \ldots, +k)$ удовлетворяют коммутационным соотношениям (123), то и $(2k+1)$ операторов $S_q^{(k)} \equiv (-1)^q T_{-q}^{(k)\dagger}$ обладают тем же свойством.

17. Показать, что интеграл

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \varphi)\, Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi)\, Y_{l_3}^{m_3}(\theta, \varphi)\, d\Omega$$

пропорционален $(-1)^{m_3} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_3 - m_3 \rangle$, а коэффициент пропорциональности не зависит от m_1, m_2 и m_3. Определить этот коэффициент. (Использовать теорему сложения, доказанную в задаче 5.)

18. Показать, что «тензорный» оператор

$$S_{12} \equiv 2\left[3\frac{(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2}{r^2} - \boldsymbol{S}^2\right],$$

рассматриваемый как функция $\boldsymbol{r}$, зависит только от углов θ и φ, и эта зависимость выражается *сферическими функциями порядка* 2. (Получаем:

$$S_{12} = \left(\frac{24\pi}{5}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ S_-^2 Y_2^2 - (S_- S_z + S_z S_-) Y_2^1 + \sqrt{\frac{2}{3}}\left(3S_z^2 - \boldsymbol{S}^2\right) Y_2^0 + \right.$$

$$\left. + (S_+ S_z + S_z S_+) Y_2^{-1} + S_+^2 Y_2^{-2} \right\} =$$

$$= \left(\frac{24\pi}{5}\right)^{\frac{1}{2}} (\boldsymbol{S}^{(2)} \cdot \boldsymbol{Y}^{(2)}).$$

Оператор S_{12} является скалярным произведением (в смысле определения (B.87)) неприводимых тензорных операторов порядка 2, $\boldsymbol{S}^{(2)}$ и $\boldsymbol{Y}^{(2)}$, которые зависят от спина и угловых переменных соответственно).

19. Пусть K_u будет компонентой векторного оператора $\boldsymbol{K}$ в данном направлении, J_u — компонентой полного углового момента $\boldsymbol{J}$ в том же направлении, а $|\tau Ja\rangle$, $|\tau Jb\rangle$ — два кет-вектора, принадлежащие одному и тому же подпространству $\mathscr{E}(\tau J)$ (определения § 16). Показать, что:

$$\langle \tau Ja \,|\, K_u \,|\, \tau Jb\rangle = \langle \tau Ja \,|\, J_u \,|\, \tau Jb\rangle \frac{\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}\rangle}{J(J+1)},$$

где $\langle \boldsymbol{JK}\rangle$ означает среднее значение скалярного оператора $\boldsymbol{JK}$ в этом подпространстве

$$\langle \boldsymbol{JK}\rangle = \langle \tau Ja \,|\, \boldsymbol{JK} \,|\, \tau Ja\rangle$$

(Другими словами, элементы матрицы $\boldsymbol{K}$ в $\mathscr{E}(\tau J)$ совпадают с матричными элементами ее «проекции» $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{JK})/J(J+1)$.)

ГЛАВА XIV

СИСТЕМЫ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ. ПРИНЦИП ЗАПРЕТА ПАУЛИ

§ 1. Тождественные частицы в квантовой теории

Две частицы называются тождественными, если все физические свойства этих частиц в точности совпадают, что исключает возможность экспериментально различать их. В классической механике это свойство *неразличимости тождественных частиц* играет второстепенную роль, тогда как в квантовой механике с ним связаны серьезные проблемы.

Рассмотрим в качестве примера столкновение двух тождественных частиц и выясним, в какой степени тождественность этих частиц влияет на результаты теории.

Если система подчиняется законам классической механики, то ее динамическое состояние определено в любой момент времени заданием величин: $\xi^{(1)} \equiv (\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(1)})$ — координата и импульс частицы 1 и $\xi^{(2)} \equiv (\boldsymbol{r}^{(2)}, \boldsymbol{p}^{(2)})$ — координата и импульс частицы 2. Эволюция системы определяется функцией Гамильтона, зависящей от 12 переменных

$$H(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}) \equiv H(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, \boldsymbol{p}^{(2)}).$$

Если задан потенциал $V(r)$, зависящий только от расстояния между двумя рассматриваемыми частицами, и если m — масса этих частиц, то

$$H(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}) = \frac{\boldsymbol{p}^{(1)\,2}}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}^{(2)\,2}}{2m} + V(|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}|). \tag{1}$$

Поскольку частицы тождественны, то их перестановка, т. е. приписывание динамического состояния частицы 1 частице 2 и *vice versa*, не должна влиять на динамические свойства системы. В частности, функция H инвариантна относительно такой перестановки:

$$H(\xi', \xi'') = H(\xi'', \xi'). \tag{2}$$

С другой стороны, состояние системы в любой момент времени можно определить лишь с точностью до перестановки индексов 1 и 2. Наблюдение системы в заданный момент времени показывает, что одна из частиц находится в некотором состоя-

нии ξ', а другая — в состоянии ξ'', однако при этом нельзя определить, в каком именно состоянии находится каждая из рассматриваемых частиц. На первый взгляд может показаться, что это обстоятельство вызывает затруднение, однако, как мы увидим ниже, это затруднение — кажущееся. Предположим, что в момент времени t_0 одна из частиц находится в состоянии ξ_0' а другая — в состоянии ξ_0''. Имеются две возможности: в состоянии 1 находится либо частица 1, либо частица 2. Однако оба варианта соответствуют одной и той же физической ситуации, ибо поскольку H обладает свойством симметрии (2), законы движения $\xi'(t)$ и $\xi''(t)$ частиц, находящихся в момент времени t_0 в состояниях ξ_0' и ξ_0'', одинаковы в обоих случаях, что соответствует одной и той же ситуации. Нужно только прийти к соглашению о том, следует ли частицу, которая в начальный момент времени находится в состоянии ξ_0', назвать частицей 1, а частицу, находящуюся первоначально в состоянии ξ_0'', — частицей 2, или же поменять нумерацию этих частиц.

Ситуация становится сложнее, если двухчастичная система подчиняется законам квантовой механики. Начало предыдущего анализа можно дословно повторить. В этом случае снова тождественность двух частиц выражается в инвариантности гамильтониана относительно перестановки динамических переменных частиц (ур. (2)) или, говоря точнее, в инвариантности относительно указанной перестановки всех физически наблюдаемых величин. Как и в классической механике, это вызывает произвол в определении состояния системы, однако теперь этот произвол более существен, а его следствия — более серьезны.

Предположим, что из наблюдения, осуществленного над системой до столкновения, следует, что одна из частиц находится в состоянии $\psi_0'(r)$, а другая — в $\psi_0''(r)$ [1]). На практике, эти функции представляют волновые пакеты, локализованные в различных областях пространства, так что функции

$$\begin{aligned} \psi_0(r^{(1)}, r^{(2)}) &\equiv \psi_0'(r^{(1)})\,\psi_0''(r^{(2)}), \\ \bar{\psi}_0(r^{(1)}, r^{(2)}) &\equiv \psi_0''(r^{(1)})\,\psi_0'(r^{(2)}) \end{aligned} \tag{3}$$

линейно независимы. Начальное наблюдение не позволяет решить вопрос о том, находится ли система в состоянии ψ_0 или в $\bar{\psi}_0$. Более точно, наблюдение состоит в одновременном измерении определенного набора совместных переменных, а обе функции, ψ_0 и $\bar{\psi}_0$, являются собственными функциями, отвечающими одному и тому же набору собственных значений, полученных в результате измерения. Поскольку любая линейная

[1]) Будем предполагать, что рассматриваемые частицы не обладают спином, подчеркивая тем самым параллель между классической и квантовой теориями.

комбинация $\lambda\psi_0 + \mu\bar{\psi}_0$ этих функций также обладает указанным свойством, то рассматриваемое наблюдение не позволяет определить, какая из линейных комбинаций соответствует исходному состоянию системы. В такой ситуации говорят о наличии *обменного вырождения*.

Исследуем теперь развитие системы во времени. Пусть $\psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t)$ и $\bar{\psi}(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t)$ — решения уравнения Шредингера, отвечающие соответственно начальным условиям ψ_0 и $\bar{\psi}_0$. Из свойства симметрии (2) гамильтониана следует, что эти решения получаются одно из другого перестановкой аргументов $\boldsymbol{r}^{(1)}$ и $\boldsymbol{r}^{(2)}$. Удобно ввести функции симметричные и антисимметричные относительно такой перестановки

$$\psi^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi + \bar{\psi}), \quad \psi^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi - \bar{\psi}).$$

Они являются решениями уравнения Шредингера, соответствующими начальным данным

$$\psi_0^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \bar{\psi}_0), \quad \psi_0^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 - \bar{\psi}_0).$$

Если система в начальный момент времени находится в состоянии

$$\Psi_0 = \alpha\psi_0^{(A)} + \beta\psi_0^{(S)} \quad (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1),$$

то в момент времени t она будет находиться в состоянии

$$\Psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t) = \alpha\psi^{(A)} + \beta\psi^{(S)}. \tag{4}$$

Плотность $P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')$ вероятности обнаружить одну из частиц в точке $\boldsymbol{r}'$, а другую — в $\boldsymbol{r}''$ определяется равенством [1])

$$P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'') = |\Psi(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2 + |\Psi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')|^2 = \tag{5}$$

$$= 2[|\alpha|^2 |\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2 + |\beta|^2 |\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2]. \tag{6}$$

Для того чтобы это выражение не зависело от α и β, следует потребовать, чтобы выполнялось равенство

$$|\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')| = |\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|.$$

Это равенство справедливо при всех $\boldsymbol{r}'$ и $\boldsymbol{r}''$ до тех пор, пока частицы не взаимодействуют, а описывающие их волновые пакеты $\psi'(\boldsymbol{r})$ и $\psi''(\boldsymbol{r})$ не перекрываются, и, вообще говоря, перестает быть справедливым, когда одно из этих условий не выполняется. В этом несложно убедиться, рассмотрев несколько конкретных ситуаций. Предположим, например, что две рассматриваемые частицы не взаимодействуют ($V(|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}|) = 0$) и свободно

[1]) Во втором равенстве учтено свойство симметрии функций $\psi^{(A)}$ и $\psi^{(S)}$: $\Psi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') = -\alpha\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'') + \beta\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')$.

перемещаются навстречу друг другу. В этом случае ψ является произведением двух свободных волновых пакетов $\psi = \psi'(\boldsymbol{r}^{(1)}, t)\psi''(\boldsymbol{r}^{(2)}, t)$. В течение некоторого промежутка времени волновые пакеты будут перекрываться, т. е. существует область пространства, в которой обе функции $\psi'(\boldsymbol{r})$ и $\psi''(\boldsymbol{r})$ отличны от нуля. Если $\boldsymbol{r}$ — точка из этой области, то

$$|\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})| = \sqrt{2}|\psi'(\boldsymbol{r})\psi''(\boldsymbol{r})| \neq 0,$$

тогда как

$$|\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})| = 0 \tag{7}$$

при всех $\boldsymbol{r}$. Другой интересный пример дает задача рассеяния на центральном потенциале. Она будет рассмотрена в § 9, где мы покажем, что амплитуда рассеяния для $\psi^{(A)}$ является суперпозицией сферических парциальных волн нечетного порядка, а для $\psi^{(S)}$ — суперпозицией волн четного порядка. В общем случае эти амплитуды различаются по абсолютной величине и, следовательно, дифференциальное сечение рассеяния будет существенно зависеть от отношения $|\alpha|^2/|\beta|^2$.

Итак, существование обменного вырождения служит источником серьезных затруднений ибо препятствует получению точных теоретических предсказаний о статистическом распределении результатов измерений, осуществляемых над системой после столкновения.

Эта трудность может быть преодолена введением следующего *постулата симметризации*, фиксирующего коэффициенты α и β в линейной комбинации (3) и, таким образом, легко допускающего экспериментальную проверку.

Динамические состояния системы двух тождественных частиц либо все симметричны ($\alpha = 0$, $\beta = 1$), *либо все антисимметричны* ($\alpha = 1$, $\beta = 0$) *относительно перестановки двух частиц.*

Какая из двух указанных возможностей реализуется в действительности, зависит от физических свойств рассматриваемых частиц. Этот постулат несложно распространить на системы, содержащие любое число тождественных частиц. В общем виде он будет приведен в разделе I настоящей главы, где будут проанализированы также основные следствия этого постулата. Раздел II посвящен приложениям.

При изложении будут использоваться некоторые элементарные свойства перестановок. Все они приведены в § 14 Дополнения Г [1]).

---

[1]) Элементы теории групп, собранные в Дополнении Г, не являются необходимыми для понимания материала настоящей главы. Содержание § 14 этого Дополнения не зависимо от его остальных частей. В § 14 используются лишь несколько определений, относящихся к теории групп (группа, класс, инвариантная подгруппа и т. п.), которые приведены в § 2 Дополнения Г.

Раздел I. **ПОСТУЛАТ СИММЕТРИЗАЦИИ**

§ 2. Подобные частицы и симметрическое представление

Рассмотрим N-частичную систему. Динамические переменные, описывающие i-ю частицу, являются функциями от ее координаты $\boldsymbol{r}^{(i)}$, импульса $\boldsymbol{p}^{(i)}$ и спина $\boldsymbol{s}^{(i)}$. Эти три вектора в дальнейшем будем обозначать одним символом $\xi^{(i)}$. Зная значение спина i-й частицы, мы можем построить пространство $\mathscr{F}^{(i)}$ ее динамических состояний. Пространство $\mathscr{E}$ динамических состояний всей системы является тензорным произведением

$$\mathscr{E} = \mathscr{F}^{(1)} \otimes \mathscr{F}^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mathscr{F}^{(N)}. \tag{8}$$

По определению, две частицы называются *подобными*, если они имеют один и тот же спин (подобные частицы не обязаны быть тождественными). В этом случае наблюдаемые и векторы состояния одной из частиц находятся во взаимно однозначном соответствии с наблюдаемыми и векторами состояния другой частицы и, следовательно, имеется возможность заменить частицу подобной ей. В общем случае, если имеется n подобных частиц, то существует $n!$ перестановок этих частиц. Каждой перестановке соответствует некоторый оператор в пространстве $\mathscr{E}$. Перейдем теперь к построению этих операторов перестановок. Для простоты будем считать, что $n = N$.

Рассмотрим одну из N подобных частиц. Пусть ξ — множество основных наблюдаемых этой частицы, а $\mathscr{F}$ — пространство ее векторов состояния. Пусть q — полный набор коммутирующих наблюдаемых в $\mathscr{F}$, а $|q_\varkappa\rangle$ — базис собственных векторов набора q, с собственными значениями $q_\varkappa$ (индекс или ряд индексов $\varkappa$ служат для нумерации собственных значений этого набора наблюдаемых). Тогда

$$\langle q_\varkappa | q_\mu \rangle = \delta_{\varkappa\mu}. \tag{9}$$

В качестве q можно, например, выбрать три компоненты x, y, z вектора $\boldsymbol{r}$ и компоненту s_z спина по оси z. Каждая частица a ($a = 1, 2, \ldots, N$) нашей системы имеет собственный набор $q^{(a)}$ коммутирующих наблюдаемых. Ясно, что множество $Q \equiv \equiv (q^{(1)}, q^{(2)}, \ldots, q^{(N)})$ является полным набором коммутирующих наблюдаемых в пространстве $\mathscr{E}$. Векторы

$$|q_\alpha^{(1)} q_\beta^{(2)} \ldots q_\nu^{(N)}\rangle \equiv |q_\alpha\rangle^{(1)} |q_\beta\rangle^{(2)} \ldots |q_\nu\rangle^{(N)}, \tag{10}$$

полученные как тензорные произведения базисных векторов пространств $\mathscr{F}^{(1)}, \mathscr{F}^{(2)}, \ldots, \mathscr{F}^{(N)}$, образуют базис некоторой реализации векторов и операторов в $\mathscr{E}$, т. е. $\{Q\}$-представление. Мы будем называть *представление* такого типа *симметрическим*.

§ 3. Операторы перестановки

Очевидно, что в состоянии, описываемом вектором (10), частица 1 находится в состоянии $|q_\alpha\rangle$, частица 2 — в состоянии $|q_\beta\rangle$, ..., частица N — в состоянии $|q_\nu\rangle$. Перестановка частиц изменяет их распределение по состояниям $|q_\alpha\rangle$, $|q_\beta\rangle$, ..., $|q_\nu\rangle$ и, следовательно, вектор (10) переходит в новый, вообще говоря [1]), отличный от исходного, базисный вектор $\{Q\}$-представления. Таким образом, операция перестановки устанавливает взаимнооднозначное соответствие между векторами рассматриваемого ортонормированного базиса и, следовательно, определяет некоторый линейный унитарный оператор в пространстве векторов состояния. Указанная процедура сопоставляет каждой перестановке N частиц *оператор перестановки* P, удовлетворяющий условию унитарности

$$PP^+ = P^+P = 1. \tag{11}$$

Так, при транспозиции (1 2) — перестановке частиц 1 и 2 — вектор (10) преобразуется в вектор, описывающий состояние, в котором частица 1 находится в состоянии $|q_\beta\rangle$, частица 2 — в $|q_\alpha\rangle$, тогда как каждая из остальных частиц находится в исходном состоянии. Соответствующий оператор перестановки $P_{(12)}$ определяется соотношением

$$P_{(12)}\,|\,q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\ldots q_\nu^{(N)}\rangle = |\,q_\beta^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\gamma^{(3)}\ldots q_\nu^{(N)}\rangle.$$

Для упрощения обозначений, мы продолжим изучение перестановок в случае $N = 3$. Устанавливаемые принципы будут, конечно, справедливы и для любого значения N. В качестве примера определим оператор $P_{(123)}$, соответствующий перестановке (1 2 3), при которой 1 переходит в 3; 2 — в 1; 3 — в 2:

$$P_{(123)}\,|\,q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle = |\,q_\gamma^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}\rangle. \tag{12}$$

Если $|\,\psi\rangle$ — вектор из $\mathscr{E}$, то

$$P_{(123)}\,|\,\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} P_{(123)}\,|\,q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\,|\,\psi\rangle =$$

$$= \sum_{\alpha\beta\gamma} |\,q_\gamma^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}\rangle\langle q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\,|\,\psi\rangle.$$

Переобозначив индексы суммирования в последней строчке, получаем

$$P_{(123)}\,|\,\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |\,q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\beta^{(1)}q_\gamma^{(2)}q_\alpha^{(3)}\,|\,\psi\rangle. \tag{13}$$

---

[1]) В случае, когда среди N одночастичных состояний $|\,q_\alpha\rangle, \ldots, |\,q_\nu\rangle$ имеются одинаковые, некоторые из перестановок оставляют вектор (10) неизменным, если же все состояния совпадают, то ни одна из перестановок не изменяет вектора (10).

Если $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ — волновая функция состояния $|\psi\rangle$ в $\{Q\}$-представлении (т. е. $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ — амплитуда вероятности обнаружить частицу 1 в состоянии $|q_\alpha\rangle$, частицу 2 — в $|q_\beta\rangle$, частицу 3 — в $|q_\gamma\rangle$), то волновой функцией для $P_{(123)}|\psi\rangle$ является функция

$$P_{(123)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi(q_\beta q_\gamma q_\alpha), \tag{14}$$

которая получена *действием на аргументы функции* $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ *перестановки обратной перестановке* (1 2 3).

Закон преобразования векторов при перестановке принимает особенно простую форму на векторах вида

$$|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle \equiv |u\rangle^{(1)}|v\rangle^{(2)}|w\rangle^{(3)},$$

на которых он совпадает с законом преобразования базисных векторов $\{Q\}$-представления. Действие P на вектор такого вида дает вектор, который получается при перестановке p частиц 1, 2, 3, находящихся в одночастичных состояниях $|u\rangle$, $|v\rangle$, $|w\rangle$, т. е. (уравнение (12))

$$P_{(123)}|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle = |w^{(1)}u^{(2)}v^{(3)}\rangle.$$

Доказательство несложно. Уравнение (13) в данном случае имеет вид

$$P_{(123)}|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle \langle q_\alpha|w\rangle\langle q_\beta|u\rangle\langle q_\gamma|v\rangle,$$

где правая часть есть не что иное как разложение $|w^{(1)}u^{(2)}v^{(3)}\rangle$ по базисным векторам $\{Q\}$-представления.

Это свойство, доказанное только что для частного случая, имеет общий характер (задача 1). Из него следует, что оператор P, соответствующий заданной перестановке, не зависит от конкретного симметрического представления, выбранного для определения этого оператора.

Действие оператора P на вектор порождает вектор, который получается из исходного перестановкой p. Точно так же преобразование оператора $F(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \ldots, \xi^{(N)})$ в пространстве $\mathscr{E}$ под действием унитарного оператора P задает оператор, получающийся из данного применением перестановки p к аргументам оператора F. Если

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & N \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \ldots & \alpha_N \end{pmatrix},$$

то

$$PF(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \ldots, \xi^{(N)})P^+ = F(\xi^{(\alpha_1)}, \xi^{(\alpha_2)}, \ldots, \xi^{(\alpha_N)}). \tag{15}$$

В частности

$$P_{(123)}F\left(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}\right)P_{(123)}^{\dagger} = F\left(\xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(1)}\right) \tag{16}$$

($\xi^{(2)}$ переходит в $\xi^{(1)}$; $\xi^{(3)}$ — в $\xi^{(2)}$; $\xi^{(1)}$ — в $\xi^{(3)}$).

Для доказательства достаточно показать, что этот закон выполняется в случае, когда F — любая из основных наблюдаемых системы. Рассмотрим одну из них. Всегда можно построить симметрическое представление, в котором наблюдаемая диагональна. Предположим для примера, что выбрана одна из рассмотренных выше наблюдаемых $q^{(i)}$ $\{Q\}$-представления. Для того чтобы показать, что $Pq^{(i)}P^{\dagger} = q^{(\alpha_i)}$, достаточно показать, что выражения, стоящие в обеих частях этого равенства, одинаково действуют на любой из базисных векторов $\{Q\}$-представления. Доказательство несложно, и мы ограничимся проверкой этого утверждения в специальном случае $N = 3$, $i = 1$, $p = (1\,2\,3)$

$$P_{(123)}q^{(1)}P_{(123)}^{\dagger}\left|q_{\alpha}^{(1)}q_{\beta}^{(2)}q_{\gamma}^{(3)}\right\rangle = P_{(123)}q^{(1)}\left|q_{\beta}^{(1)}q_{\gamma}^{(2)}q_{\alpha}^{(3)}\right\rangle = q_{\beta}P_{(123)}\left|q_{\beta}^{(1)}q_{\gamma}^{(2)}q_{\alpha}^{(3)}\right\rangle =$$
$$= q_{\beta}\left|q_{\alpha}^{(1)}q_{\beta}^{(2)}q_{\gamma}^{(3)}\right\rangle = q^{(2)}\left|q_{\alpha}^{(1)}q_{\beta}^{(2)}q_{\gamma}^{(3)}\right\rangle.$$

В применении к наблюдаемым приведенное определение перестановок согласуется с интуитивным: наблюдаемая $PBP^{\dagger}$, полученная в результате применения перестановки p к наблюдаемой B, имеет тот же спектр собственных значений, что и B, а собственные векторы наблюдаемой $PBP^{\dagger}$ получаются действием оператора перестановки P на собственные векторы наблюдаемой B, соответствующие тому же собственному значению.

В частности наблюдаемая B инвариантна относительно перестановки N частиц, если $PBP^{\dagger} = B$ для каждой из $N!$ перестановок этих частиц, т. е. если

$$[P, B] = 0$$

для любого P. В этом случае говорят, что наблюдаемая B *симметрична* относительно перестановки N частиц.

§ 4. Алгебра операторов перестановки. Симметризаторы и антисимметризаторы

Последовательное действие двух перестановок p', p'' эквивалентно действию одной перестановки $p = p''p'$. Из определения оператора перестановки очевидно, что то же соотношение справедливо и для соответствующих операторов P, P', P''

$$P = P''P'. \tag{17}$$

Таким образом, операторы перестановок удовлетворяют тем же алгебраическим соотношениям, что и определяющие их перестановки [1]).

В частности, любой оператор P можно записать в виде произведения транспозиций. В общем случае такая факторизация не единственна. Однако все такие представления состоят либо из четного, либо из нечетного числа транспозиций. Четность перестановки обозначается $(-1)^p$ и равна $+$ или $-$ в соответствии с четностью или нечетностью числа транспозиций, образующих перестановку. Если P, P' и P'' связаны соотношением (17), то очевидно имеем: $(-1)^p = (-1)^{p'+p''}$.

Некоторые перестановки, в частности транспозиции, совпадают со своими обратными. В таких случаях (см. ур. (11)) соответствующий оператор является наблюдаемой, возможные собственные значения которой равны ± 1.

В качестве примера рассмотрим транспозицию (ij):

$$P_{(ij)}^2 = 1. \tag{18}$$

Собственные векторы с собственным значением $+1$ инвариантны при транспозиции (ij). Они, по определению, являются *симметричными* по i и j. Проектор на подпространство векторов, симметричных по i и j, есть *оператор симметризации*

$$S_{[ij]} = \frac{1}{2}(1 + P_{(ij)}). \tag{19}$$

Собственные векторы с собственным значением -1 изменяют знак при транспозиции (ij). Эти векторы, по определению, антисимметричны по i и j. Проектором на подпространство векторов, антисимметричных по i и j, является *оператор антисимметризации*

$$A_{[ij]} = \frac{1}{2}(1 - P_{(ij)}). \tag{20}$$

---

[1]) В частности, $P_{(123)} = P_{(12)}P_{(23)}$. Проверим, что последовательное действие $P_{(23)}$ и $P_{(12)}$ на волновую функцию $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ снова дает результат (14). Обозначим

$$\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) \equiv P_{(23)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma).$$

Тогда

$$\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi(q_\alpha q_\gamma q_\beta)$$

и

$$P_{(123)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = P_{(12)}\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi_1(q_\beta q_\alpha q_\gamma) = \psi(q_\beta q_\gamma q_\alpha).$$

Тот же результат будет получен и в том случае, когда на аргументы функции $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ действует сперва перестановка (1 2), а затем перестановка (2 3).

Очевидно, справедливы соотношения

$$\begin{aligned} S_{[ij]} + A_{[ij]} &= 1, & P_{(ij)}S_{[ij]} &= S_{[ij]}P_{(ij)} = S_{[ij]}, \\ S_{[ij]} - A_{[ij]} &= P_{(ij)}, & P_{(ij)}A_{[ij]} &= A_{[ij]}P_{(ij)} = -A_{[ij]}. \end{aligned} \tag{21}$$

Каждый вектор является суммой вектора, антисимметричного по i и j, и вектора, симметричного по i и j. Разложения такого типа использовались при обсуждении рассеяния двух тождественных частиц в § 1.

Расширим понятия симметрии и антисимметрии динамических состояний, которое было определено выше лишь для перестановок $P_{(ij)}$, на общий случай $N!$ перестановок P.

Выберем вектор $|u\rangle$ в $\mathscr{E}$ и обозначим $\mathscr{E}_u$ — подпространство, натянутое на вектор $|u\rangle$ и на все векторы, которые могут быть получены из него перестановками. Размерность подпространства $\mathscr{E}_u$ равна $N!$, если $N!$ векторов $P|u\rangle$ линейно независимы и меньше $N!$, если эти векторы линейно зависимы.

Экстремальным случаем будет ситуация, когда все $P|u\rangle$ представляют одно и то же состояние

$$P|u\rangle = c_p|u\rangle \tag{22}$$

для любой перестановки p. Ниже будут приведены условия, ограничивающие произвол в выборе постоянных c_p. Если P — транспозиция, то, как мы знаем, c_p может принимать только значения ± 1. Далее, поскольку любая транспозиция (ij) равна произведению $(1i)\,(2j)\,(1\,2)\,(2j)\,(1i)$, то

$$P_{(ij)} = P_{(1i)}P_{(2j)}P_{(12)}P_{(2j)}P_{(1i)}$$

или

$$c_{(ij)} = c^2_{(1i)}c^2_{(2j)}c_{(12)} = c_{(12)}. \tag{23}$$

Следовательно, постоянная c совпадает для всех транспозиций: либо $c_{\mathrm{tr}} = +1$, либо $c_{\mathrm{tr}} = -1$, и так как всякая перестановка является произведением транспозиций, то соответствующая постоянная c_p имеет вид степени c_{tr} либо с четным, либо с нечетным натуральным показателем в соответствии с четностью или нечетностью перестановки p.

Таким образом, мы приходим к выводу, что уравнение (22) справедливо только в двух следующих случаях:

(а) для любого p, $c_p = 1$, $\quad P|u\rangle = |u\rangle$; (24)

(б) для любого p, $c_p = (-1)^p$, $\quad P|u\rangle = (-1)^p|u\rangle$. (25)

Вектор $|u\rangle$ называется *симметричным* или *антисимметричным* относительно перестановки N частиц в зависимости от того, какой случай (а) или (б) имеет место.

Симметричные векторы образуют подпространство $\mathscr{E}^{(S)}$ в $\mathscr{E}$, а антисимметричные векторы образуют в $\mathscr{E}$ подпространство

$\mathscr{E}^{(A)}$, ортогональное к $\mathscr{E}^{(S)}$. Покажем, что проекторами на эти подпространства являются соответственно операторы

$$S=\frac{1}{N!}\sum_P P, \quad A=\frac{1}{N!}\sum_P (-1)^p P \tag{26}$$

($\sum_P$ распространяется на все $N!$ возможных перестановок). Рассмотрим последовательность, полученную произвольным упорядочением всех перестановок. Если каждый элемент умножить справа и слева на оператор P_1 некоторой перестановки, то в результате будет изменен только порядок расстановки элементов в рассматриваемой последовательности, так что

$$P_1 S = S P_1 = S, \quad P_1 A = A P_1 = (-1)^{p_1} A. \tag{27}$$

Замена каждого элемента P обратным $P^\dagger$ также сказывается лишь на порядке следования элементов, и так как перестановка и обратная к ней имеют одну и ту же четность, то

$$S=S^\dagger, \quad A=A^\dagger. \tag{28}$$

Из равенств (27) и определений (26) легко получить соотношения

$$S^2=S, \quad A^2=A \tag{29}$$

и

$$SA=AS=0. \tag{30}$$

Соотношения (28)—(30) показывают, что S и A являются ортогональными проекторами. Далее, если $|u\rangle$ содержится в $\mathscr{E}^{(S)}$, то из (24) имеем

$$S|u\rangle=\frac{1}{N!}\sum_P P|u\rangle=\left(\frac{1}{N!}\sum_P\right)|u\rangle=|u\rangle$$

и обратно, если $|\rangle$ — произвольный вектор, то согласно (27) получаем

$$PS|\rangle=S|\rangle.$$

Следовательно, S действительно является проектором на $\mathscr{E}^{(S)}$. Аналогичным образом можно показать, что A является проектором на $\mathscr{E}^{(A)}$.

В случае $N=3$ для S и A легко вывести явные формулы

$$S=\frac{1}{6}(1+P_{(12)}+P_{(23)}+P_{(31)}+P_{(123)}+P_{(321)}),$$

$$A=\frac{1}{6}(1-P_{(12)}-P_{(23)}-P_{(31)}+P_{(123)}+P_{(321)}).$$

Как видно из этого примера, $S + A \neq 1$ при $N > 2$. Действительно, $S + A$ является проектором на пространство состояний, инвариантных относительно четной перестановки N частиц, которое при $N > 2$ является подпространством в $\mathscr{E}$.

Вернемся к определенному выше пространству $\mathscr{E}_u$. Из соотношений (27) следует, что для любого P справедливы равенства $SP|u\rangle = S|u\rangle$, $AP|u\rangle = (-1)^p A|u\rangle$.

Таким образом, растягивающие $\mathscr{E}_u$ векторы $P|u\rangle$ имеют одну и ту же проекцию на $\mathscr{E}^{(S)}$ и с точностью до знака одинаковую проекцию на $\mathscr{E}^{(A)}$. Следовательно, в соответствии с тем, являются ли векторы $S|u\rangle$ отличными от нуля или нет, $\mathscr{E}_u$ содержит либо один и только один симметричный вектор, либо вовсе не содержит таковых и аналогично, в зависимости от того равен нулю или отличен от нуля вектор $A|u\rangle$, $\mathscr{E}_u$ содержит один и только один антисимметричный вектор либо не содержит ни одного [1]).

§ 5. Тождественные частицы и постулат симметризации

Если все N частиц рассмотренной выше системы будут не только подобны, но и тождественны, то ни одно из динамических свойств системы не изменится в результате любой перестановки этих частиц. Из этого свойства инвариантности можно вывести важные следствия относительно имеющихся законов движения и наблюдаемых системы.

Если $|\psi_0\rangle$ — состояние системы в начальный момент времени t_0, то ее состояние в более поздний момент времени t можно получить действием оператора эволюции $U(t, t_0)$: $|\psi_t\rangle = U(t, t_0)|\psi\rangle$. Если начальное состояние $P|\psi_0\rangle$, то эволюция системы отличается от исходной лишь перестановкой P, и в момент времени t система будет находится в состоянии $P|\psi_t\rangle$. Следовательно,

$$U(t, t_0)P|\psi_0\rangle = P|\psi_t\rangle = PU(t, t_0)|\psi_0\rangle$$

и так как эти равенства должны выполняться при любом выборе $|\psi_0\rangle$, то

$$[P, U(t, t_0)] = 0. \tag{31}$$

Пусть H — гамильтониан системы, тогда $U(t, t_0)$ является решением уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = HU(t, t_0),$$

удовлетворяющим начальному условию $U(t_0, t_0) = 1$. Из (31) и соотношения, получаемого из него дифференцированием по t,

[1]) Если $N!$ векторов $P|u\rangle$ линейно независимы, то конкретные линейные комбинации $S|u\rangle$ и $A|u\rangle$ этих векторов, конечно, отличны от нуля. В этом случае $\mathscr{E}_u$ содержит один симметричный и один антисимметричный вектор.

имеем

$$[P, H] = 0. \tag{32}$$

Обратно, если H и P коммутируют, то оператор $U(t, t_0)$ и его преобразование $PUP^\dagger$ при перестановке совпадают, так как удовлетворяют одному и тому же уравнению Шредингера с одним и тем же начальным условием. Следовательно, U и P коммутируют. Итак, условие (32) коммутации гамильтониана H со всеми операторами перестановок P является необходимым и достаточным для инвариантности уравнений движения относительно перестановок.

Рассмотрим теперь физическую наблюдаемую [1]) B исследуемой системы и пусть $|u\rangle$ собственный вектор B, соответствующий собственному значению b. Если система находится в состоянии $|u\rangle$, то при измерении B результатом всегда будет b, а если система находится в состоянии $P|u\rangle$, полученным действием оператора перестановки P на вектор $|u\rangle$, то измерение B должно дать тот же результат

$$BP|u\rangle = bP|u\rangle$$

для любой перестановки P. Иными словами, каждый вектор из пространства $\mathscr{E}_u$, порождаемого действием всевозможных перестановок N частиц на состояние $|u\rangle$, в свою очередь должен быть собственным вектором оператора B, соответствующим тому же собственному значению b (обменное вырождение). Для справедливости этого утверждения при всех собственных значениях наблюдаемой B необходимо и достаточно (ср. § VII. 15), чтобы при всех P выполнялось равенство

$$[B, P] = 0. \tag{33}$$

Таким образом, *N частиц тождественны, если гамильтониан H и все физические наблюдаемые системы симметричны относительно перестановки этих частиц.*

Следовательно, при определении состояния системы одновременным измерением переменных q каждой отдельной частицы состояние будет определено, в лучшем случае, лишь с точностью до обменного вырождения [2]). Можно будет ут-

---

[1]) Выражению *физическая наблюдаемая* был придан смысл в § XIII. 15. Приводимый анализ инвариантности относительно перестановок можно сравнить с анализом инвариантности физической наблюдаемой относительно «вращений на 2π», приведенным в указанном параграфе.

[2]) $q^{(1)}, q^{(2)}, \ldots, q^{(N)}$ образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых в пространстве $\mathscr{E}$, но только симметричные функции этих величин могут быть физическими наблюдаемыми, однако эти функции уже не образуют полного набора в $\mathscr{E}$. Постулат симметризации, который будет введен далее, состоит в ограничении пространства векторов состояния до некоторого подпространства в $\mathscr{E}$, в котором рассматриваемые физические наблюдаемые образуют полный набор (и из которого, следовательно, полностью устранено обменное вырождение).

верждать, что n_1 частиц из полного числа частиц N находятся в состоянии $|q_1\rangle$; n_2 — в состоянии $|q_2\rangle$, ...; $n_\varkappa$ — в состоянии $|q_\varkappa\rangle$, ... $(n_1 + n_2 + \ldots + n_\varkappa + \ldots = N)$; однако, наличность частиц в каждом из этих состояний останется неопределенной. В $\{Q\}$-представлении имеется $(N!/n_1!\, n_2! \ldots n_\varkappa! \ldots)$ базисных векторов, обладающих рассматриваемым свойством. Пусть $\mathscr{E}(n_1 n_2 \ldots n_\varkappa \ldots)$ — пространство, образованное этими векторами (порождаемыми действием $N!$ перестановок на одно из них, выбранное произвольно). Состояние системы описывается одним из векторов этого пространства, но рассмотренное выше измерение не позволяет определить, каким именно. Однако, как мы видели в примере, приведенном в § 1, предсказания теории существенно зависят от того, в каком состоянии находится система, и эта неопределенность является источником действительного затруднения. Она может быть устранена введением постулата симметризации: *состояния системы, содержащей N тождественных частиц, будут все либо симметричными, либо антисимметричными относительно перестановок этих N частиц.*

Какое из этих предписаний следует применять, зависит от природы рассматриваемых тождественных частиц. Частицы с симметричными состояниями называются *бозонами*, а с антисимметричными — *фермионами*. (Мотивировка этих наименований станет ясной из дальнейшего.) *Эксперимент показывает*, что встречающиеся в природе элементарные частицы спина $^1/_2$ (электроны, протоны, нейтроны и т. д.) являются фермионами, тогда как частицы с целым спином (фотоны, π-мезоны и т. д.) — бозонами.

Определенное выше пространство $\mathscr{E}(n_1 n_2 \ldots n_\varkappa \ldots)$ имеет не более чем один симметричный и не более чем один антисимметричный вектор. Таким образом, постулат симметризации полностью устраняет обменное вырождение. Остается только показать, что этот постулат не приводит к противоречиям с основными положениями квантовой механики, относящимися к эволюции физических систем и измерению физических величин.

Рассмотрим случай бозонов (фермионы можно рассмотреть тем же способом). В предыдущем параграфе мы определили проектор S на симметричные состояния. Он является комбинацией операторов перестановки (ур. (26)) и, следовательно, коммутирует с оператором эволюции $U(t, t_0)$ системы

$$[S, U(t, t_0)] = 0 \tag{34}$$

и физическими наблюдаемыми

$$[S, B] = 0. \tag{35}$$

Соотношение (34) показывает, что если система находилась первоначально в симметричном состоянии, то она будет оста-

ваться в симметричном состоянии до тех пор, пока не будет внешнего возмущения. Из соотношения (35) следует, что S и B имеют по крайней мере один общий набор базисных векторов. Если состояние системы симметрично, то разложение вектора состояния по этому базису содержит только симметричные собственные векторы оператора B. Таким образом, очевидно, что операция измерения наблюдаемой B оставит систему в симметричном состоянии.

§ 6. Бозоны и статистика Бозе—Эйнштейна

Рассмотрим систему N бозонов. Состояния системы образуют подпространство $\mathscr{E}^{(S)}$ пространства $\mathscr{E}$. Из векторов $\{Q\}$-представления можно построить базис в пространстве $\mathscr{E}^{(S)}$.

В каждом подпространстве $\mathscr{E}(n_1 n_2 \ldots n_\varkappa \ldots)$ мы можем построить один и только один нормированный симметричный вектор (определенный с точностью до фазового множителя)

$$\left[\frac{N!}{n_1!\, n_2! \ldots n_\varkappa! \ldots}\right]^{1/2} S \left| q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots \right\rangle, \tag{36}$$

где $\left| q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots \right\rangle$ — базисный вектор $\{Q\}$-представления, в котором первые n_1 частиц находятся в состоянии $|q_1\rangle$, следующие n_2 частиц — в состоянии $|q_2\rangle$, ..., следующие $n_\varkappa$ частиц — в состоянии $|q_\varkappa\rangle$, ...; S — определенный выше (ур. (26)) оператор симметризации, а в квадратных скобках стоит нормирующий множитель ($0! = 1$). Доказать это можно следующим образом.

Перестановка двух частиц, находящихся в одном и том же состоянии, не изменяет вектор $\left| q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots \right\rangle$, тогда как перестановка двух частиц, находящихся в разных состояниях, порождает другой базисный вектор $\{Q\}$-представления. В общем случае, рассматриваемый вектор инвариантен относительно любой из $\prod n_\varkappa! \equiv n_1! n_2! \ldots n_\varkappa! \ldots$ перестановок, не изменяющих распределение частиц по состояниям $|q_1\rangle$, $|q_2\rangle$, ... $|q_\varkappa\rangle$, ...; любая из остальных перестановок переводит его в другой базисный вектор $\{Q\}$-представления. Применяя каждую из $N!$ перестановок к $\left| q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots \right\rangle$, мы получим $\left[N!/\prod n_\varkappa!\right]$ базисных векторов пространства $\mathscr{E}(n_1 n_2 \ldots n_\varkappa \ldots)$, каждый из которых будет получен $\left(\prod n_\varkappa!\right)$ раз. Вектор (36) равен сумме этих базисных векторов, умноженной на $\left[\prod n_\varkappa!/N!\right]^{1/2}$ и, следовательно, симметричен и нормирован на единицу.

Итак, каждой последовательности n_1, n_2, ... $n_\varkappa$, ... неотрицательных целых чисел такой, что

$$n_1 + n_2 + \ldots + n_\varkappa + \ldots = N,$$

соответствует одно и только одно симметричное состояние системы, которое описывается вектором (36). Множество таких векторов образует ортонормированный базис в $\mathscr{E}^{(S)}$.

Покажем теперь, *что бозонный газ подчиняется статистике Бозе — Эйнштейна.* Бозонным газом называют систему, образованную очень большим числом N бозонов, взаимодействие между которыми достаточно слабое, так что в первом приближении им можно пренебречь. Гамильтониан H системы можно записать в виде суммы N одночастичных гамильтонианов

$$H = h^{(1)} + h^{(2)} + \ldots + h^{(i)} + \ldots + h^{(N)}. \tag{37}$$

Согласно теории Больцмана равновесное термодинамическое состояние реализуется, когда система находится в наиболее вероятном «макроскопическом состоянии». Данное «макроскопическое состояние» в действительности является набором квантовых состояний (или «микроскопических состояний»), близких друг другу, так что на макроскопическом уровне их невозможно различить. Согласно эргодической гипотезе микроскопические состояния с одинаковой энергией равновероятны. Вероятность заданного макроскопического состояния пропорциональна числу образующих его различных микроскопических состояний. Определение термодинамического равновесия системы существенно зависит от этого числа. Будем предполагать, что h содержится в множестве q динамических переменных, определяющих $\{Q\}$-представление. Каждое распределение

$$n_1, n_2, \ldots, n_\varkappa, \ldots$$

N частиц по различным возможным одночастичным состояниям

$$|q_1\rangle, |q_2\rangle, \ldots, |q_\varkappa\rangle, \ldots$$

определяет одно и только одно микроскопическое состояние системы (описываемое вектором (36)). В этом как раз и состоит основное предположение статистики Бозе — Эйнштейна, в которой частицы считаются неразличимыми. Следовательно, в статистике Бозе — Эйнштейна состояния системы, отличающиеся друг от друга только различными расположениями тождественных частиц, заселяющих различные одночастичные состояния, рассматриваются как одно и то же микроскопическое состояние. С другой стороны, в статистике Максвелла — Больцмана, каждая частица предполагается различимой на микроскопическом уровне и $[N!/\prod n_\varkappa!]$ состояний системы, соответствующих одному и тому же распределению $n_1, n_2, \ldots, n_\varkappa, \ldots$, рассматриваются как различные микроскопические состояния.

Важное замечание. Оператор плотности, описывающий состояние системы в термодинамическом равновесии, имеет вид

$$\rho = \mathrm{e}^{-H/kT}/\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-H/kT}. \tag{38}$$

Другие формы записи оператора ρ, полученные из этого выражения в § VIII. 25, сохраняют справедливость. Главное отличие, вводимое в теорию постулатом симметризации, заключается в том, что ρ ставится оператором в $\mathscr{E}^{(S)}$, а не во всем пространстве $\mathscr{E}$, и различные вычисления квантовой статистики, в частности нахождение следов, следует проводить именно в этом суженном пространстве. Итак, в случае, когда H имеет вид (37), оператор плотности ρ, рассматриваемый как оператор в пространстве $\mathscr{E}$, является тензорным произведением операторов, определенных на одночастичных пространствах $\mathscr{F}^{(1)}$, $\mathscr{F}^{(2)}$, ..., $\mathscr{F}^{(N)}$,

$$\rho = \prod_{i=1}^{N} [e^{-h^{(i)}/kT} / \mathrm{Tr}_i e^{-h^{(i)}/kT}].$$

Однако эта факторизация теряет смысл, если ρ является оператором в $\mathscr{E}^{(S)}$, ибо каждый из N множителей, взятый в отдельности, не является оператором в $\mathscr{E}^{(S)}$.

§ 7. Фермионы и статистика Ферми — Дирака. Принцип запрета

Анализ, подобный приведенному выше, можно провести и в случае системы N фермионов. Ее состояния образуют подпространство $\mathscr{E}^{(A)}$ в $\mathscr{E}$.

В $\{Q\}$-представлении мы получаем полный набор ортонормированных антисимметричных векторов, взяв по одному нормированному антисимметричному вектору (если таковые существуют) в каждом из подпространств $\mathscr{E}(n_1 n_2 \ldots n_\varkappa \ldots)$. Для существования такого вектора необходимо и достаточно, чтобы вектор $A\left|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots\right\rangle$ был отличен от нуля. Предположим, что среди целых чисел $n_1, n_2, \ldots, n_\varkappa, \ldots$ по крайней мере одно превосходит 1. В этом случае в состоянии, описываемом вектором $\left|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots\right\rangle$, по крайней мере две частицы, скажем i-я и j-я, заселяют одно и то же одночастичное состояние, так что рассматриваемый вектор симметричен относительно обмена этих частиц, т. е.

$$\left|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots\right\rangle = \frac{1}{2}(1 + P_{(ij)})\left|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots\right\rangle.$$

Но из (27) следует

$$A(1 + P_{(ij)}) = 0,$$

так что

$$A\left|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \ldots q_\varkappa^{n_\varkappa} \ldots\right\rangle = 0. \tag{39}$$

Другими словами, *два фермиона не могут занимать одно и то же одночастичное состояние одновременно.* Это утверждение известно как *принцип запрета Паули* [1]).

Предположим теперь, что каждое одночастичное состояние занято не более чем одной частицей ($n_\varkappa = 0$ или 1). Вектор

$$A\left|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\ldots q_\varkappa^{n_\varkappa}\ldots\right\rangle \equiv \frac{1}{N!}\sum_P (-1)^p P\left|q_1^{n_1}q_2^{n_2}\ldots q_n^{n_\varkappa}\ldots\right\rangle$$

является суммой $N!$ взаимноортогональных векторов и, следовательно, отличен от нуля. Его норма равна $(1/N!)$. Если $|q_\alpha\rangle$, $|q_\beta\rangle$, ..., $|q_\nu\rangle$ есть N занятых одночастичных состояний, то соответствующее антисимметричное состояние описывается нормированным вектором $\sqrt{N!}A\left|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}\ldots q_\nu^{(N)}\right\rangle$. Этот вектор можно представить в виде определителя $N\times N$-го порядка (*определитель Слэтера*)

$$\sqrt{N!}A\left|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}\ldots q_\nu^{(N)}\right\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |q_\alpha\rangle^{(1)} & |q_\alpha\rangle^{(2)} & \ldots & |q_\alpha\rangle^{(N)} \\ |q_\beta\rangle^{(1)} & |q_\beta\rangle^{(2)} & \ldots & |q_\beta\rangle^{(N)} \\ \vdots & & & \\ |q_\nu\rangle^{(1)} & |q_\nu\rangle^{(2)} & \ldots & |q_\nu\rangle^{(N)} \end{vmatrix}. \qquad (40)$$

Тождество (40) можно проверить непосредственно, разложив определитель, стоящий в правой части. Более того, соотношение (40) остается справедливым, когда некоторые из N одночастичных состояний тождественны, так как в этом случае две или большее число строк матрицы совпадают и определитель равен нулю, что соответствует принципу Паули.

Таким образом, каждому набору $|q_\alpha\rangle$, $|q_\beta\rangle$, ..., $|q_\nu\rangle$ из N различных состояний, выбранных из одночастичных состояний $|q_1\rangle$, $|q_2\rangle$, ..., $|q_\varkappa\rangle$, ..., *соответствует* одно и только одно антисимметричное состояние, описываемое вектором (40). Полученное в результате множество векторов образует ортонормированный базис в $\mathscr{E}^{(A)}$.

Фермионный газ подчиняется статистике Ферми — Дирака. Доказательство подобно доказательству аналогичного утверждения в бозонном случае. Единственное различие состоит в нумерации микроскопических состояний. Каждый набор из N различных одночастичных состояний определяет одно и только одно микроскопическое состояние системы фермионов, описываемое

[1]) Принцип запрета был сформулирован Паули в 1925 г. как общее свойство электронов, позволяющее объяснить структуру спектров сложных атомов (ср. § 12).

вектором (40). В этом и состоит основное положение статистики Ферми — Дирака, которая означает, что эти частицы неразличимы и что не более чем одна из них может находиться в каждом из одночастичных состояний.

Замечание, приведенное в конце предыдущего параграфа, применимо также и к фермионам. Оператор плотности для системы фермионов, находящихся в термодинамическом равновесии, определяется равенством (38), однако в этом случае он является оператором в $\mathscr{E}^{(A)}$.

Итак, различия между тремя типами статистик для тождественных частиц обусловлено различным определением пространства векторов состояния, как это указано в табл. I.

Таблица I

Статистика	Максвелла — Больцмана	Бозе — Эйнштейна	Ферми — Дирака
Тип частиц	Различимые	Неразличимые	Неразличимые + принцип запрета
Пространство векторов состояния	$\mathscr{E}$	$\mathscr{E}^{(S)}$	$\mathscr{E}^{(A)}$

§ 8. Всегда ли необходимо симметризовать волновую функцию?

Рассмотрим систему n тождественных частиц. Если частицами являются электроны, то состояние системы описывается антисимметричной волновой функцией. Однако во вселенной имеются не только эти электроны. Отказ от учета влияния других электронов и рассмотрение системы электронов в виде целого, отделенного от всего остального, предполагает, что на динамические свойства рассматриваемых n электронов не влияет наличие других электронов. Возникает вопрос, является ли такое предположение хорошо обоснованным или существуют определенные корреляции между n электронами исследуемой системы и другими электронами, не входящими в нее, что означало бы несправедливость рассматриваемого предположения.

В практических приложениях все электроны системы содержатся внутри некоторой области D пространства, а интересующие нас динамические свойства соответствуют измерениям, которые следует проводить внутри этой области. Оказывается, что

наличие других электронов можно попросту не учитывать до тех пор, пока они остаются вне области D, и до тех пор, пока их взаимодействие с электронами системы остается пренебрежимо малым. Этот результат имеет общий характер и в одинаковой степени применим как к фермионам, так и к бозонам. Докажем его для специального случая системы, состоящей из двух фермионов.

Если пренебречь наличием всех остальных частиц, то динамическое состояние двух фермионов описывается нормированной антисимметричной волновой функцией $\varphi(1, 2)$, где 1 и 2 обозначают координаты и компоненты s_z спина частиц 1 и 2 соответственно. В общем случае, заданное состояние системы, скажем состояние χ, описывается антисимметричной нормированной волновой функцией $\chi(1, 2)$. Если в заданный момент времени система находится в состоянии φ, то ее динамические свойства в этот момент времени определяются набором вероятностей

$$w = |\langle \chi | \varphi \rangle|^2. \tag{41}$$

В реальной ситуации два рассматриваемых фермиона составляют часть системы из N фермионов. Рассмотрим вопрос о том, совпадают ли полученные динамические свойства с теми, которые могут быть найдены при учете существования остальных $(N-2)$ фермионов. Пусть $\Psi(3, 4, \ldots, N)$ — нормированная антисимметричная волновая функция, описывающая динамическое состояние остальных $(N-2)$ фермионов. Если фермионы 1 и 2 не тождественны с фермионами 3, 4, ..., N, то состояние всей системы описывается волновой функцией

$$\varphi(1, 2)\Psi(3, 4, \ldots, N)$$

и сохраняет это свойство факторизуемости до тех пор, пока взаимодействие между двумя выделенными фермионами и остальными фермионами системы остается пренебрежимо малым. В действительности же, вектор $|\Phi\rangle$, корректно описывающий состояние всей системы, пропорционален антисимметричному вектору $A|\varphi\Psi\rangle$, где A — оператор антисимметризации N частиц (определение (26)).

По предположению, волновые пакеты φ и Ψ не перекрываются, иначе говоря, с достоверностью известно, что два фермиона находятся внутри указанной области D пространства, тогда как остальные расположены вне D. Более того, нас интересуют только динамические свойства двух фермионов, находящихся внутри D.

Обозначим $\Theta(3, 4, \ldots, N)$ нормированную антисимметричную волновую функцию, обращающуюся в нуль в случае, когда какие-либо из $(N-2)$ координатных векторов $r^{(3)}, \ldots, r^{(N)}$ на-

ходятся внутри D. Волновая функция Ψ описывает состояние системы из $(N-2)$ фермионов, находящихся вне D. По предположению, Ψ является функцией такого типа. Если функции $\Theta_1, \Theta_2, \ldots, \Theta_i, \ldots$ образуют полный ортонормированный базис функций указанного вида, то

$$\Psi = \sum_i \Theta_i \langle \Theta_i | \Psi \rangle.$$

Обозначим $\chi(1, 2)$ произвольную нормированную антисимметричную волновую функцию частиц 1 и 2, обращающуюся в нуль, когда хотя бы один из векторов, $r^{(1)}$ или $r^{(2)}$, находится вне D. Следовательно, χ описывает два фермиона, находящихся внутри D. По предположению функция φ имеет такой вид.

Перестановки N частиц можно разбить на два класса в соответствии с их действием на вектор $|\chi\Theta\rangle$. Перестановки первого типа, обозначаемые F, изменяют только знак вектора $|\chi\Theta\rangle$. Имеется всего $2!(N-2)!$ перестановок, меняющих местами частицы 1 и 2 или переставляющих частицы 3, 4, ..., N друг с другом. Таким образом,

$$F|\chi\Theta\rangle = (-1)^f |\chi\Theta\rangle.$$

Все остальные перестановки G переставляют по крайней мере одну из частиц 1, 2 с одной из остальных $(N-2)$ частиц. Следовательно $G|\chi\Theta\rangle$ описывает состояние, в котором по крайней мере одна из частиц (1, 2) находится вне D, так что этот вектор ортогонален любому вектору $|\chi\Theta\rangle$

$$\langle \chi'\Theta' | G | \chi\Theta \rangle = 0.$$

Далее, получаем следующее тождество:

$$\langle \chi'\Theta' | A | \chi\Theta \rangle = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^p \langle \chi'\Theta' | P | \chi\Theta \rangle =$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_F (-1)^f \langle \chi'\Theta' | F | \chi\Theta \rangle =$$

$$= \frac{2!\,(N-2)!}{N!} \langle \chi'\Theta' | \chi\Theta \rangle. \qquad (42)$$

Заметим, что норма вектора $A|\chi\Theta\rangle$ равна $\langle \chi\Theta | A | \chi\Theta \rangle$, т. е. $2!(N-2)!/N!$.

Нам надо определить вероятность w того, что два фермиона, расположенные внутри D, находятся в состоянии χ. Если бы $(N-2)$ оставшихся фермиона были отличны от этих двух, то состояние системы описывалось бы вектором $|\varphi\Psi\rangle$, а искомая вероятность определялась бы по формуле

$$\sum_i |\langle \chi\Theta_i | \varphi\Psi \rangle|^2 = |\langle \chi | \varphi \rangle|^2 \left(\sum_i |\langle \Theta_i | \Psi \rangle|^2 \right) = |\langle \chi | \varphi \rangle|^2. \qquad (43)$$

Поскольку все N фермионов тождественны, состояние системы имеет вид

$$|\Phi\rangle = \sqrt{C_N^2}A|\varphi\Psi\rangle \quad \left(C_N^2 = \frac{N!}{2!\,(N-2)!}\right),$$

а искомая вероятность есть вероятность обнаружить систему в одном из состояний, описываемых ортонормированными антисимметричными векторами

$$|X_i\rangle = \sqrt{C_N^2}\,A|\chi\Theta_i\rangle,$$

т. е.

$$w = \sum_i |\langle X_i|\Phi\rangle|^2 = (C_N^2)^2 \sum_i |\langle\chi\Theta_i|A|\varphi\Psi\rangle|^2.$$

Из (42) и (43) следует

$$w = \sum_i |\langle\chi\Theta_i|\varphi\Psi\rangle|^2 = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2,$$

что совпадает с (41).

Итак, результат, который получен в пренебрежении остальными $(N-2)$ фермионами, является корректным.

Раздел II. ПРИЛОЖЕНИЯ

§ 9. Столкновение двух тождественных бесспиновых частиц

В этом параграфе мы подведем итоги обсуждению задачи о столкновении, рассмотренной в § 1.

Пусть $(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P})$ и $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ — динамические переменные центра масс и относительного движения двух частиц

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}^{(1)} + \boldsymbol{r}^{(2)}), \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}. \tag{44}$$

Гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{4m} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{m} + V(\boldsymbol{r}), \tag{45}$$

а динамическое состояние системы в любой заданный момент времени описывается волновой функцией $\Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r})$, зависящей от $\boldsymbol{R}$ и $\boldsymbol{r}$.

При перестановке частиц $\boldsymbol{R}$ не меняется, а $\boldsymbol{r}$ переходит в $-\boldsymbol{r}$. Поскольку волновая функция обязана удовлетворять постулату

симметризации, то [1])

$$\Psi(\boldsymbol{R}, -\boldsymbol{r}) = \pm \Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}), \tag{46}$$

где верхний знак берется в случае, когда обе частицы — бозоны, а нижний — фермионы.

Сперва рассмотрим эту задачу, предполагая, что частицы различимы. Ее решение приведено в разделе I главы X. Напомним кратко решение этой задачи, сохраняя обозначения § X. 4—7. До столкновения ($t \ll 0$) состояние системы, образованной частицей мишени и налетающей частицей, характеризуется относительной скоростью $\boldsymbol{v} = \hbar\boldsymbol{k}/{}^1\!/_2 m$ и прицельным параметром $\boldsymbol{b}$. Запишем волновую функцию в виде произведения $\Phi(\boldsymbol{R}, t)\varphi_t(\boldsymbol{r}, t)$, где Φ и φ — два свободных нормированных волновых пакета [2]). В системе центра масс групповая скорость волны $\Phi(\boldsymbol{R}, t)$ равна нулю, а волна $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ распространяется со скоростью v. В приближениях, используемых при вычислении поперечного сечения, расплыванием пакета $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ можно пренебречь, так что его форма фиксирована и может быть определена соотношением (ур. (13))

$$\varphi_b(\boldsymbol{r}, t) = e^{-ikb - iEt/\hbar}\chi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{v}t - \boldsymbol{b})\, e^{ikr}. \tag{47}$$

После столкновения ($t \gg 0$) волновая функция $\Psi_b(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t)$, удовлетворяющая этим начальным условиям, имеет вид

$$\Psi_b(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t) = \Phi(\boldsymbol{R}, t)\left[\varphi_b(\boldsymbol{r}, t) + \psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r}, t)\right], \tag{48}$$

где $\psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r}, t)$ — расплывающийся волновой пакет (ур. (20))

$$\psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r}, t) \sim e^{-ik\cdot b - iEt/\hbar}\chi[\boldsymbol{u}(r - vt) + \boldsymbol{s} - \boldsymbol{b}]\, f(\theta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{49}$$

Поскольку рассмотрение ведется в системе центра масс, волновой пакет $\Phi(\boldsymbol{R}, t)$ остается сконцентрированным в начале коор-

---

[1]) Перестановка является операцией, отличной от пространственного отражения, при котором оба аргумента $\boldsymbol{R}$ и $\boldsymbol{r}$ изменяют знак. В приводимом нами обсуждении, когда предполагается, что частицы бесспиновые, и когда, как мы увидим ниже, центр масс не играет существенной роли, эти две операции можно легко спутать, поскольку они одинаково действуют на функцию относительного движения.

[2]) Строго говоря, начальное состояние должно описываться произведением вида (3), поскольку до столкновения корреляции между частицами отсутствуют. Произведение $\Phi\varphi$ представимо в форме (3) только в том случае, когда волны Φ и φ имеют специальный вид. Например,

$$\Phi\varphi \sim \exp\left[i\left(\boldsymbol{K}\boldsymbol{R} + \boldsymbol{k}\boldsymbol{r}\right) - a\left(4\left(\boldsymbol{R} - \boldsymbol{R}_0\right)^2 + \left(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0\right)^2\right)\right].$$

Однако вычисление сечений не зависит от конкретного вида начальных волновых пакетов, и можно пренебречь ошибкой, которая обусловлена тем, что в качестве исходного берется волновой пакет вида $\Phi\varphi$. Все это неявно предполагалось в обсуждении, приведенном в § 7.

динат и сечение рассеяния $\sigma^{(1)}(\Omega)$ первой частицы в направлении $\Omega = (\theta, \varphi)$ равно сечению рассеяния в относительной системе для того же направления, т. е. (§ X. 6)

$$\sigma^{(1)}(\Omega) = |f(\theta, \varphi)|^2. \tag{50}$$

Сечение рассеяния $\sigma^{(2)}(\Omega)$ второй частицы в направлении Ω равно сечению рассеяния в относительной системе в противоположном направлении, т. е.

$$\sigma^{(2)}(\Omega) = |f(\pi - \theta, \varphi + \pi)|^2. \tag{51}$$

В случае, когда частицы тождественны, в приведенное рассмотрение необходимо ввести две важные модификации:

(а) детектор уже не может различить частицы 1 и 2, следовательно, сечение $\sigma(\Omega)$ должно быть переопределено;

(б) функция Ψ_b должна быть соответствующим образом симметризована.

Модификация (а) характерна не только для квантово-механического рассмотрения. Определим $\sigma(\Omega)$ как число частиц (1 и 2), испущенных в телесном угле $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ за единицу времени в расчете на единичный падающий поток, т. е. (ср. ур. (5))

$$\sigma(\Omega) = \sigma^{(1)}(\Omega) + \sigma^{(2)}(\Omega). \tag{52}$$

Отметим, что в этом случае

$$\sigma^{(\mathrm{tot})} = \frac{1}{2}\int \sigma(\Omega)\, d\Omega, \tag{53}$$

если мы сохраняем обычное определение полного сечения рассеяния $\sigma^{(\mathrm{tot})}$ как числа частиц, отклоненных от падающего потока за единицу времени в расчете на единичный падающий поток.

С другой стороны, модификация (б) является специфическим квантовым эффектом. Соответствующим образом симметризованный волновой пакет, воспроизводящий *те же начальные условия*, что и $\Psi_b(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t)$, определяется, как мы сейчас покажем, выражением

$$\hat{\Psi}_b(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_b(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t) \pm \Psi_b(\boldsymbol{R}, -\boldsymbol{r}, t)].$$

До столкновения, т. е. при $t \ll 0$, эта функция $\hat{\Psi}_b$ имеет вид $\Phi(\boldsymbol{R}, t)\hat{\varphi}_b(\boldsymbol{r}, t)$, где (ур. (47))

$$\hat{\varphi}_b(\boldsymbol{r}, t) = e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{b} - iEt/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{v}t - \boldsymbol{b})\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \pm \chi(-\boldsymbol{r} - \boldsymbol{v}t - \boldsymbol{b})\, e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}].$$

Таким образом, $\Phi\hat{\varphi}$ является суммой двух волн. Первая описывает начальное состояние в системе центра масс при столкнове-

нии, в котором частица 1 налетает на частицу 2 с относительной скоростью $\boldsymbol{v}$ и прицельным параметром $\boldsymbol{b}$, тогда как вторая волна определяет состояние, в котором частицы 1 и 2 поменялись местами. Поскольку эти волны не перекрываются (так как $t \ll 0$), а каждая из них имеет норму $1/2$, то $\Phi\hat{\Phi}$ является нормированной волновой функцией, описывающей, подобно $\Phi\varphi$, две частицы, налетающие друг на друга с относительной скоростью $\boldsymbol{v}$ и с прицельным параметром $\boldsymbol{b}$.

После столкновения $\hat{\Psi}_{\boldsymbol{b}}$, подобно $\Psi_{\boldsymbol{b}}$, является суммой двух членов (ср. ур. (48)). Первый член $\Phi\hat{\Phi}$ описывает проходящую волну и не дает вклада в сечение, второй член $\Phi\hat{\psi}^{(d)}$ описывает рассеянную волну и получается из $\Phi\psi^{(d)}$ применением к $\psi^{(d)}$ операции симметризации того же типа, что и при переходе от $\Psi_{\boldsymbol{b}}$ к $\hat{\Psi}_{\boldsymbol{b}}$

$$\hat{\psi}_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r}, t) \pm \psi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(-\boldsymbol{r}, t)\right].$$

Возвращаясь к асимптотическому выражению (49), видим, что переход от $\Phi\psi^{(d)}$ и $\Phi\hat{\psi}^{(d)}$ состоит в замене амплитуды рассеяния $f(\theta, \varphi)$ на симметризованную амплитуду

$$\hat{f}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[f(\theta, \varphi) \pm f(\pi - \theta, \varphi + \pi)\right].$$

Используя выражение для рассеянных волновых пакетов, получаем сечение рассеяния тем же способом, что и в случае различимых частиц

$$\sigma^{(1)}(\Omega) = |\hat{f}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{2}|f(\theta, \varphi) \pm f(\pi - \theta, \varphi + \pi)|^2,$$

$$\sigma^{(2)}(\Omega) = |\hat{f}(\pi - \theta, \varphi + \pi)|^2 = \sigma^{(1)}(\Omega).$$

В соответствии с определением (52)

$$\sigma(\Omega) = 2|\hat{f}(\theta, \varphi)|^2 = |f(\theta, \varphi) \pm f(\pi - \theta, \varphi + \pi)|^2. \qquad (54)$$

Напомним, что амплитуда рассеяния является коэффициентом при расходящейся волне в стационарном решении уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{m}(\Delta + k^2)\psi(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}),$$

имеющим асимптотический вид

$$e^{ikr} + f(\theta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r}.$$

Симметризованная амплитуда рассеяния $\hat{f}(\theta, \varphi)$ получается умножением на $\sqrt{2}$ либо четной части амплитуды $f(\theta, \varphi)$, либо

ее нечетной части, в зависимости от того, являются ли рассматриваемые частицы бозонами или фермионами. Если V — центральный потенциал, то четная часть $f(\theta)$ является суммой вкладов от парциальных волн четного порядка, а нечетная часть — суммой вкладов от парциальных волн нечетного порядка. При энергиях, достаточно малых для того, чтобы основной вклад давала бы s-волна, два (бесспиновых) фермиона практически не рассеиваются друг на друге, в то время как сечение рассеяния двух бозонов в четыре раза больше чем в случае различимых частиц. (Амплитуда рассеяния умножается на $\sqrt{2}$, а сечение равно удвоенному квадрату модуля симметризованной амплитуды, что и дает в результате множитель 4.)

§ 10. Столкновение протонов

Проведенное в предыдущем параграфе исследование может быть легко распространено на случай столкновения двух тождественных частиц со спином. В качестве примера рассмотрим столкновение двух протонов, предполагая, что потенциал взаимодействия имеет центральную симметрию. Полный спин является постоянной движения, однако взаимодействие в синглетном и триплетном состояниях может быть различным.

Пусть $f_s(\theta)$ и $f_t(\theta)$ обозначают соответствующие несимметризованные амплитуды рассеяния. Поскольку протоны являются фермионами, волновая функция должна быть антисимметричной относительно перестановки этих частиц. Если функция описывает триплетное состояние, то она симметрична относительно обмена спинов и, следовательно, антисимметрична относительно перестановки координат $\boldsymbol{r}^{(1)}$ и $\boldsymbol{r}^{(2)}$, так что симметризованная амплитуда рассеяния имеет вид

$$\hat{f}_t(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}[f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)].$$

Поперечное сечение рассеяния протонов в триплетном состоянии

$$\sigma_t(\Omega) = 2\,|\hat{f}_t(\theta)|^2 = |f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)|^2.$$

Если же волновая функция описывает синглетное состояние, то она является антисимметричной при обмене спинов и, следовательно, симметричной относительно обмена пространственных координат, так что в этом случае симметризованная амплитуда рассеяния имеет вид

$$\hat{f}_s(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}[f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)].$$

Таким образом, поперечное сечение рассеяния двух протонов в синглетном состоянии

$$\sigma_s(\Omega) = 2|f_s(\theta)|^2 = |f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)|^2.$$

Если мишень и налетающий поток состоят из неполяризованных протонов, то в каждом столкновении имеется случайное распределение спинов у налетающей частицы и частицы мишени. Поскольку пространство триплетных состояний трехмерно, а пространство синглетных состояний одномерно, то полный спин в начальном состоянии с вероятностью $^3/_4$ будет равен единице и с вероятностью $^1/_4$ равняется нулю, так что

$$\sigma(\Omega) = \frac{3}{4}\sigma_t(\Omega) + \frac{1}{4}\sigma_s(\Omega) =$$

$$= \frac{3}{4}|f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{4}|f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)|^2. \quad (55)$$

Если дополнительно предположить независимость потенциала от спина, то

$$f_s(\theta) = f_t(\theta) = f(\theta),$$

и мы получаем окончательно

$$\sigma(\Omega) = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - \frac{1}{2}[f^*(\theta) f(\pi-\theta) + f(\theta) f^*(\pi-\theta)]. \quad (56)$$

В частности, в области достаточно низких энергий, когда можно пренебречь ядерными силами и рассматривать $V(r)$ как отталкивающий кулоновский потенциал e^2/r, амплитуда рассеяния $f(\theta)$ определяется формулой (XI. 33), а сечение рассеяния — *формулой Мотта*

$$\sigma(\Omega) = \left(\frac{e^2}{4E}\right) \times$$

$$\times\left[\sin^{-4}\frac{\theta}{2} + \cos^{-4}\frac{\theta}{2} - \sin^{-2}\frac{\theta}{2}\cos^{-2}\frac{\theta}{2}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\ln\left(\operatorname{tg}^2\frac{\theta}{2}\right)\right)\right], \quad (57)$$

где E — энергия в системе центра масс, а v — относительная скорость двух протонов. Полезно сравнить этот результат с формулой Резерфорда (ур. (XI. 36)).

Классическое рассмотрение дает только два первых члена формулы Мотта

$$\sigma_{cl}(\Omega) = \left(\frac{e^2}{4E}\right)^2\left[\sin^{-4}\frac{\theta}{2} + \cos^{-4}\frac{\theta}{2}\right].$$

Третий член обусловлен чисто квантовым эффектом интерференции амплитуд рассеяния $f(\theta)$ и $f(\pi - \theta)$. Если $e^2/\hbar v \gg 1$, то этот член осциллирует около нуля тем быстрее, чем больше мы отклоняемся от угла $\theta = {}^1/_2\pi$ (в любом направлении). В пределе $\hbar \to 0$ эти осцилляции, сохраняя амплитуду, становятся все

более быстрыми, так что среднее значение сечения $\sigma(\Omega)$, усредненное по малому, но не нулевому телесному углу $\rho(\Omega)$, стремится к классическому сечению $\sigma_{cl}(\Omega)$.

§ 11. Статистика атомных ядер

Во многих задачах ядра атомов можно рассматривать как частицы, имеющие определенный спин j.

В атомной физике это приближение весьма эффективно. Атомное ядро является ансамблем $\mathcal{N}$ нуклонов: Z протонов и N нейтронов ($\mathcal{N} = Z + N$). Динамические переменные атомного ядра описываются функциями фундаментальных переменных образующих ядро $\mathcal{N}$ частиц. Пусть $\boldsymbol{R}$ и $\boldsymbol{P}$ — координата и импульс центра масс (ср. § IX. 13). Обозначим ρ набор внутренних переменных: спинов, относительных координат и импульсов нуклонов. Среди этих переменных особенно существен полный момент импульса j внутренних переменных, так называемый *спин ядра*. Момент j представляет собой сумму спинов $\mathcal{N}$ отдельных нуклонов, и $(\mathcal{N} - 1)$-го относительного орбитального момента импульса. Согласно правилу сложения моментов j может принимать как целые, так и полуцелые значения, в зависимости от того является ли $\mathcal{N}$ четным или нечетным.

В отсутствие внешнего поля движение центра масс отделяется, и гамильтониан системы представим в виде суммы двух членов: кинетической энергии центра масс $\boldsymbol{P}^2/2M$ (здесь M — полная масса ядра) и внутренней энергии $h(\rho)$, включающей как кинетическую энергию нуклонов, так и энергию их взаимодействий друг с другом. Гамильтониан h имеет определенное число связанных состояний. Обозначим ε_0 собственное значение, соответствующее основному состоянию. Поскольку силы между нуклонами инвариантны относительно вращений, то $h(\rho)$ коммутирует с тремя компонентами векторного оператора $\boldsymbol{j}$ (см. гл. VIII). Каждому собственному значению в дискретном спектре гамильтониана соответствует определенное собственное значение j спина, которое $(2j + 1)$-кратно вырождено. В дальнейшем j обозначает спин основного состояния, μ — возможные значения $j_z (\mu = -j, \ -j + 1, \ \ldots, \ +j)$, а χ_μ — собственную функцию основного состояния с моментом импульса $(j\mu)$

$$h(\rho)\chi_\mu = \varepsilon_0 \chi_\mu, \quad j_z \chi_\mu = \mu \chi_\mu.$$

Эти $(2j + 1)$ векторов χ_μ отличаются друг от друга только своей ориентацией. Все они могут быть получены один из другого действием операторов j_+, j_- и образуют базис представления векторного оператора $\boldsymbol{j}$. Радиус ядра имеет порядок от 10^{-13} до 10^{-12} *см* и, следовательно, среднее межнуклонное расстояние для ядра в состоянии χ_μ имеет тот же порядок.

До тех пор пока ядро остается в основном состоянии волновая функция системы имеет вид $\sum_\mu \psi(\boldsymbol{R}, \mu)\chi_\mu$, и ядро можно рассматривать как частицу со спином j и волновой функцией $\psi(\boldsymbol{R}, \mu)$ в представлении $\{\boldsymbol{R}, j_z\}$, поскольку $h(\rho)$ в гамильтониане может быть заменено на постоянную ε_0, а $\psi(\boldsymbol{R}, \mu)$ развивается во времени так же, как и волновая функция свободной частицы массы M (с точностью до не имеющего физического значения постоянного фазового множителя).

Если ядро находится во внешнем поле, например, в электрическом поле с потенциалом $V(\boldsymbol{r})$, то гамильтониан будет содержать, помимо уже упомянутых выше членов, члены, отвечающие взаимодействию Z протонов с внешним полем. В этом случае ядро можно рассматривать как частицу со спином j только приближенно, так как гамильтониан теперь не коммутирует с $h(\rho)$. Однако если поле незначительно изменяется на расстояниях, имеющих тот же порядок, что и радиус ядра, то это приближение остается достаточно хорошим, ибо в этих условиях значение поля в месте нахождения каждого из протонов можно заменить его значением в центре масс. В этом случае внешнее взаимодействие равно $ZeV(\boldsymbol{R})$ и собственные состояния гамильтониана имеют вид $\sum_\mu \psi(\boldsymbol{R}, \mu)\chi_\mu$, где $\psi(\boldsymbol{R}, \mu)$ — стационарное состояние частицы массы M спина j и заряда Ze в электрическом потенциале [1]) $V(\boldsymbol{R})$.

Рассмотрим систему из n ядер, каждое из которых находится в своем основном состоянии. Приближение, в котором каждое из ядер рассматривается как частица с заданным спином будет оправдано до тех пор, пока эти ядра будут достаточно удалены друг от друга, что имеет место, например, в случае молекулы или твердого тела. Пусть $\boldsymbol{R}^{(i)}$ координата i-го ядра, а $\mu^{(i)}$ есть z-компонента его спина. Тогда волновая функция системы зависит от $\boldsymbol{R}^{(i)}$ и $\mu^{(i)}$, а движение системы определяется гамильтонианом, зависящим от переменных $\boldsymbol{R}^{(i)}$, $\boldsymbol{P}^{(i)}$ и $\boldsymbol{j}^{(i)}$.

Рассмотрим, как изменяется это упрощенное описание при введении постулата симметризации. Можно ожидать, что симметризация будет существенна лишь в том случае, когда некоторые из ядер тождественны. Это можно доказать тем же методом, что и в § 8. Два разных ядра являются различными частицами, несмотря на тождественность частиц, протонов и нейтронов, составляющих эти ядра.

---

[1]) Первая поправка к этому приближению сохраняет используемое наглядное представление о ядре и состоит в приписывании ядру квадрупольного момента (если $j \geqslant 1$), который может быть представлен в виде функции от компонент $\boldsymbol{j}$ и приводит к взаимодействию между спином ядра и внешним полем.

Рассмотрим систему двух тождественных ядер спина j. Будем описывать состояние системы волновой функцией

$$\psi(\boldsymbol{R}^{(1)}, \mu^{(1)}; \boldsymbol{R}^{(2)}, \mu^{(2)}).$$

Перестановка двух ядер — операция P, определяемая соотношением

$$P\psi = \psi(\boldsymbol{R}^{(2)}, \mu^{(2)}; \boldsymbol{R}^{(1)}, \mu^{(1)}).$$

В действительности, система содержит $2Z$ протонов и $2N$ нейтронов, и ее динамическое состояние получается антисимметризацией по протонам и нейтронам вектора

$$\Psi = \sum_{\mu_1\mu_2} \psi(\boldsymbol{R}^{(1)}, \mu_1; \boldsymbol{R}^{(2)}, \mu_2)\, \chi^{(1)}_{\mu_1}\chi^{(2)}_{\mu_2}.$$

Операция P состоит в замене координат и спинов протонов и нейтронов первого из ядер на координаты и спины протонов и нейтронов, второго — для всех $\mathcal{N}$ элементарных перестановок. Поскольку каждая из последних приводит к изменению знака у антисимметризованного вектора, то получаем

$$P\Psi = (-1)^{\mathcal{N}}\Psi.$$

Так что

$$P\psi = (-1)^{\mathcal{N}}\psi.$$

Сказанное легко может быть распространено на системы, содержащие более двух тождественных ядер. Волновая функция должна быть симметрична или антисимметрична относительно перестановок тождественных ядер в соответствии с четностью или нечетностью числа нуклонов, образующих ядро.

Иными словами, ядра атомов будут:

(а) *бозонами*, если они содержат *четное* число нуклонов;

(б) *фермионами*, если они содержат *нечетное* число нуклонов.

Эти различия в статистике могут неожиданно проявиться во многих явлениях, в которых на первый взгляд чисто ядерные эффекты представляются несущественными. Именно такая ситуация возникает при исследовании удивительных свойств жидкого гелия (He^4) при очень низких температурах. He^4 подчиняется статистике Бозе — Эйнштейна, тогда как его изотоп He^3 подчиняется статистике Ферми — Дирака и ведет себя при низких температурах совершенно иначе.

В дальнейшем (§ XVIII.17) мы еще раз встретимся с необходимостью учета статистики ядер при описании полосатых спектров гомонуклеарных диатомных молекул.

§ 12. Сложные атомы. Приближение центрального поля

Принцип Паули существен при описании спектров сложных атомов.

В отсутствие внешнего поля гамильтониан атома не зависит от спинов его Z электронов и определяется формулой (XIII. 71). Для большей точности следовало бы добавить члены, соответствующие спин-орбитальному взаимодействию, но в рамках настоящего обсуждения ими можно пренебречь. За исключением специального случая атома водорода ($Z = 1$) задача на собственные значения для такого гамильтониана не может быть решена в явном виде.

Для определения стационарных состояний атома часто используется приближение независимых частиц или *приближение центрального поля*, согласно которому каждый из электронов движется независимо от других в центральном потенциале $V(r)$, описывающем притяжение со стороны ядра, и усредненный эффект отталкивания от других электронов. Ясно, что упомянутый эффект зависит от динамического состояния электронов, и таким образом один потенциал $V(r)$ не может даже приближенно объяснить особенности всего спектра атома. Однако если ограничиться изучением основного и первых возбужденных состояний атома, то вид $V(r)$ можно фиксировать, и чем разумнее будет выбор потенциала, тем лучше будет приближение. Суммарное действие электронов приводит к экранированию кулоновского поля ядра, что становится все более заметным по мере удаления от ядра: $V(r)$, имеющий вид $-Ze^2/r$ вблизи начала координат, с ростом r все более значительно отклоняется от чисто кулоновской формы и переходит в $-e^2/r$ в асимптотической области. Эти полуколичественные рассмотрения достаточны для наших целей. В дальнейшем мы обсудим два метода определения $V(r)$: метод Томаса — Ферми (§ 13) и метод Хартри — Фока (гл. XVIII).

В приближении центрального поля гамильтониан имеет вид

$$H = h^{(1)} + h^{(2)} + \ldots + h^{(Z)}, \tag{58}$$

где

$$h = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

Собственными векторами гамильтониана H являются определители Слэтера порядка $Z \times Z$, которые могут быть построены из базисных векторов оператора h. Собственное значение оператора H, соответствующее данному определителю Слэтера, равно сумме энергий Z одночастичных состояний, которые участвуют

в построении этого детерминанта. Таким образом, задачу на собственные значения для H легко решить, если известно решение задачи для одночастичного гамильтониана h.

Оператор h является гамильтонианом частицы со спином 1/2, которая находится в не зависящем от спина центральном потенциале. Решение соответствующей задачи на собственные значения в случае бесспиновых частиц было приведено в главе IX. Наличие спина приводит лишь к двукратному вырождению каждого уровня. Операторы h, l^2, l_z и s_z образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, базисные векторы $|nlm_lm_s\rangle$ которого нумеруются четырьмя квантовыми числами n, l, m_l, m_s. Спиновое квантовое число m_s может принимать значения $\pm 1/2$; главное квантовое число n определяется так же, как и в задаче об атоме водорода. (Число нулей радиальной волновой функции равно $n-l-1$.) Поскольку энергия каждого состояния ε_{nl} зависит только от n и l, то каждый отдельный уровень $2(2l+1)$-кратно вырожден.

Порядок следования уровней ε_{nl} в спектре энергии слабо зависит от формы потенциала $V(r)$. При заданном l уровни расположены в порядке возрастания n. Если бы $V(r)$ был чисто кулоновским потенциалом, то все уровни, отвечающие данному значению n ($l=0, 1, \ldots, n-1$), совпадали бы (см. рис. 36, т. 1). Экранирующий эффект остальных электронов приводит к тому, что эти уровни поднимаются с увеличением среднего расстояния электрона от ядра, следовательно, уровни растут с ростом n и l. Если ограничиться рассмотрением основных и возбужденных состояний атома, то порядок следования уровней для всех атомов практически один и тот же:

$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$[4s, 3d]$	$4p$	$[5s, 4d]$	$5p$	$[6s, 4f, 5d]$	$6p$	$[7s, 5f, 6d]$
2	2	6	2	6	2+10	6	2+10	6	2+14+10	6	2+14+10

Уровни, заключенные в скобки, почти совпадают, и их порядок может меняться при переходе от одного атома к другому. Число, стоящее под каждым из термов, дает кратность вырождения соответствующего уровня.

Каждому набору Z одночастичных состояний соответствует определитель Слэтера и, следовательно, стационарное состояние атома. Энергия этого состояния равна сумме энергий составляющих его одночастичных состояний и зависит только от числа электронов, находящихся на каждом из уровней ε_{nl}. Задание чисел заполнения каждого одночастичного уровня определяет *конфигурацию*. При таком определении состояния, отвечающие одной и той же конфигурации, имеют одинаковые энергии.

Пусть ν_i — число электронов, занимающих уровень ε_i, ν_i не превосходит вырождения g_i этого уровня. Если $\nu_i = g_i$, то элек-

троны образуют *замкнутую оболочку*, если $\nu_i < g_i$, то *оболочка не заполнена*. Имеется

$$g_i!/\nu_i!\,(g_i - \nu_i)!$$

способов распределения ν_i электронов по g_i одночастичным состояниям уровня. Следовательно, почти все конфигурации вырождены за исключением тех, которые целиком состоят из заполненных оболочек.

Для образования конфигурации основного состояния надо разместить Z электронов на низших энергетических уровнях. Эти электроны занимают h оболочек, из которых первые $(h-1)$ заполнены, а последняя в общем случае не заполнена, за исключением некоторых значений Z ($Z = 2$, 4, 10, 12, 18 и т. д.).

Рассмотрим для примера атом углерода ($Z = 6$). В основном состоянии оболочки $1s$ и $2s$ заполнены, а два оставшихся электрона находятся на $2p$-оболочке. Поскольку имеется $C_6^2 = 15$ способов размещения этих электронов по 6 уровням этой оболочки, то основное состояние атома углерода (в приближении независимых частиц) 15-кратно вырождено. В случае неона ($Z = 10$) основное состояние состоит из трех заполненных оболочек: $1s$, $2s$ и $2p$ и, следовательно, невырождено.

Электроны, заполняющие низшие оболочки, находятся на наиболее близком расстоянии от ядра. Химические свойства атомов практически не зависят от движения этих электронов. При низких энергиях, которыми характеризуются химические реакции, взаимодействия между атомами зависят в основном, если не исключительно, лишь от движения электронов на внешних оболочках. Следовательно, два атома, внешние оболочки которых имеют сходную электронную структуру, имеют близкие химические свойства. Так, внешней оболочкой для всех инертных газов (Ne, Ar, Kr, Xe) является заполненная p-оболочка. У галогенов (F, Cl, Br, I) на внешней p-оболочке отсутствует один электрон. Наконец, у щелочных элементов (Na, K, Rb, Cs) на s-оболочке имеется всего один электрон, а p-оболочка, расположенная сразу под s-оболочкой полностью заполнена. В общем случае положение каждого элемента в периодической таблице легко может быть предсказано, если известен порядок заполнения его электронных оболочек [1]).

---

[1]) Дальнейшие детали квантовомеханического объяснения химических свойств атомов имеются в работах: *М. Борн.* Атомная физика. М., Мир, 1967; *L. Pauling, E. B. Wilson.* Introduction to Quantum Mechanics, New-York, McGraw-Hill, 1935. Общую теорию атомных спектров см. в кн.: *Е. Кондон, Т. Шортли.* Теория атомных спектров. М., ИЛ., 1949; *G. Racah.* Phys. Rev. **62**, 438 (1942); **63**, 367 (1943).

§ 13. Модель атома Томаса — Ферми

Потенциал основного состояния в случае $Z \gg 1$ можно определить, используя полуклассический метод, развитый Томасом и Ферми.

Пусть $\rho(r)$ — плотность вероятности обнаружить электрон в элементе объема $(r, r + dr)$ в случае, когда атом находится в основном состоянии. Мы будем предполагать, что эта функция сферически симметрична. Она удовлетворяет условию нормировки

$$4\pi \int_0^\infty \rho(r)\, r^2\, dr = Z. \tag{59}$$

Z электронов образует вокруг ядра облако с отрицательным электрическим зарядом средней плотности $-e\rho(r)$. Заряды атома создают усредненный электрический потенциал $\Phi(r)$, который определяется:

(i) точечным зарядом Ze ядра, помещенного в начало координат;

(ii) непрерывным распределением электрического заряда с плотностью $-e\rho(r)$.

Потенциал Φ является решением уравнения Пуассона

$$\Delta\Phi \equiv \frac{1}{r}\left(\frac{d^2}{dr^2}\, r\right)\Phi = 4\pi e\rho, \tag{60}$$

которое ведет себя в начале координат согласно условию

$$\lim_{r\to 0} r\Phi = Ze. \tag{61}$$

В пределе $Z \gg 1$ электрическое поле, порождаемое одним электроном, мало по сравнению с полем остальных электронов, и в приближении независимых частиц потенциал, действующий на каждый электрон, имеет вид $-e\Phi(r)$.

В основном состоянии атома Z электронов занимают Z низших квантовых состояний частицы с массой m в поле $-e\Phi$. Плотность $\rho(r)$ равна сумме плотностей $|\psi|^2$ первых Z уровней. Это означает наличие функциональной связи между $\rho(r)$ и потенциалом $-e\Phi$. Для определения этой зависимости мы обратимся к следующему *«полуклассическому» приближению.*

В классическом пределе число стационарных состояний в полосе энергий $(\varepsilon, \varepsilon + \delta\varepsilon)$ пропорционально объему, занятому этой полосой в фазовом пространстве соответствующей классической частицы. Коэффициент пропорциональности равен $2/h^3$, что в два раза больше, чем множитель, использованный в § VI. 11, из-за того, что электрон имеет два состояния спина. Когда заполнены Z низших квантовых состояний, распределение

энергии электронов в атоме совпадает с распределением энергии статистической смеси Z классических электронов, имеющих в фазовом пространстве плотность

$$n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \begin{cases} \frac{2}{h^3}, & \text{если} \quad \varepsilon \equiv \frac{p^2}{2m} - e\Phi < \varepsilon_0, \\ 0, & \text{если} \quad \varepsilon > \varepsilon_0, \end{cases} \tag{62}$$

где ε_0 — энергия высшего из заполненных уровней. Поскольку начало отсчета энергии можно фиксировать произвольно, мы положим $\varepsilon_0 = 0$.

Квазиклассическое приближение состоит в предположении, что электроны в атоме имеют то же пространственное распределение, что и классическая статистическая смесь

$$\rho(r) = \int n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})\, d\boldsymbol{p} = \frac{2}{h^3} \int\limits_{\varepsilon<0} d\boldsymbol{p}.$$

Заменив ε его выражением через $\boldsymbol{p}$ и Φ, находим после несложного интегрирования

$$\rho(r) = \begin{cases} \frac{8\pi}{3h^3} (2me\Phi)^{3/2}, & \text{если} \quad \Phi > 0, \\ 0, & \text{если} \quad \Phi < 0. \end{cases} \tag{63}$$

Подставив (63) в правую часть равенства (60), получаем дифференциальное уравнение второго порядка для Φ. С учетом соотношений (59) и (61) эта функция определена полностью. Равенства (61), (63), (59) и (62) являются основными соотношениями модели Томаса — Ферми.

Для определения Φ и ρ из полученных соотношений удобно сделать следующую замену переменной и функции:

$$r = Z^{-1/3} b x, \quad \Phi = \frac{Ze}{r} \chi, \tag{64}$$

где

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0{,}5 \cdot 10^{-8}\ см. \tag{65}$$

Из (63) получаем ρ как функцию безразмерных величин χ и x

$$\rho = \begin{cases} \frac{Z^2}{4\pi b^3} \left(\frac{\chi}{x}\right)^{3/2}, & \text{если} \quad \chi > 0, \\ 0, & \text{если} \quad \chi < 0. \end{cases} \tag{66}$$

Основное уравнение (60) эквивалентно уравнению

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \begin{cases} x^{-1/2}\chi^{3/2}, & \text{если} \quad \chi > 0, \\ 0, & \text{если} \quad \chi < 0. \end{cases} \tag{67}$$

Условие (61) означает, что $\chi(0)=1$. Из уравнения (67) следует, что $\chi(x)$ очевидно имеет не более чем один нуль в интервале $(0, \infty)$; если χ обращается в нуль в точке x_0, то χ положительно в интервале $(0, x_0)$ и отрицательно в интервале (x_0, ∞). Следовательно, учитывая (64), (66) и (67), условие (59) можно переписать в виде

$$1=\int_0^{x_0}\sqrt{x}\,\chi^{3/2}\,dx=\int_0^{x_0}x\chi''\,dx=x\chi'-\chi\Big|_0^{x_0}=x_0\chi'(x_0)+1.$$

Это условие требует, чтобы производная χ' обращалась в нуль в точке x_0, а значит χ обращается в нуль только на бесконечности.

Итак, $\chi(x)$ есть решение уравнения

$$\chi''=x^{-1/2}\chi^{3/2}, \qquad (68)$$

удовлетворяющее условиям

$$\chi(0)=1, \quad \chi(\infty)=0. \qquad (69)$$

Функция $\chi(x)$ может быть найдена численным интегрированием. На рис. 5 изображена соответствующая кривая. Зная $\chi(x)$, мы можем найти $\rho(r)$ и $\Phi(r)$.

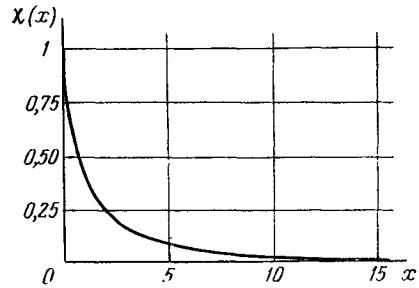


Рис. 5. Функция Томаса—Ферми $\chi(x)$: $\chi''=x^{-1/2}\chi^{3/2}$, $\chi^{(0)}=1$, $\chi(\infty)=0$.

Для оправдания классического приближения, необходимо, чтобы большая часть Z одноэлектронных состояний находилась бы «в области больших квантовых чисел», т. е. чтобы $Z\gg 1$. Для заданного атома плотность электронов $\rho(r)$ и электростатический потенциал $\Phi(r)$, определяемые в рамках модели Томаса — Ферми, имеют вид, который получается в пределе, когда квант действия $\hbar$ и заряд каждого электрона $(-e)$ становятся бесконечно малыми, число электронов Z становится бесконечным, а характеристическая длина $\hbar^2/me^2$ и полный заряд электронного облака $(-Ze)$ остаются постоянными [1]).

Метод Томаса — Ферми позволяет оценить радиус атома. В определении этой величины имеется некоторый произвол, поскольку плотность электронов становится равной нулю только на бесконечности и, следовательно, атом не является объектом,

[1]) Метод Томаса — Ферми дает неправильную оценку плотности электронов вблизи начала координат ($r\leqslant b/Z$), а также в асимптотической области ($r\gg b$). В начале координат функция $\rho(r)$ расходится, как $r^{-3/2}$, вместо того чтобы оставаться конечной, тогда как на бесконечности она стремится к нулю, как r^{-6}, а не экспоненциально.

занимающим хорошо определенную область пространства. Радиусом атома мы называем радиус $R(\alpha)$ сферы с центром в начале координат, которая содержит заданную часть $(1-\alpha)$ от Z электронов атома. Согласно этому определению

$$(1-\alpha)\,Z = 4\pi \int_0^R \rho(r)\, r^2\, dr.$$

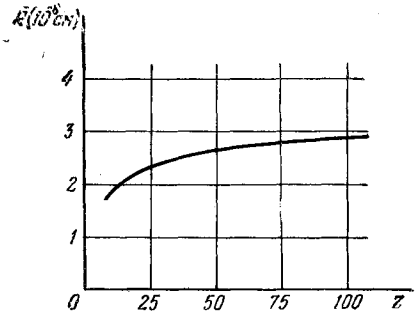


Рис. 6. Зависимость радиуса $\bar{R}$ от Z атома в теории Томаса — Ферми

$$4\pi \int_0^{\bar{R}} \rho(r)\, r^2\, dr = Z - 1.$$

Обозначим

$$R(\alpha) = Z^{-1/3} b X(\alpha).$$

Учитывая соотношения (64), (66) и (68), получаем следующее уравнение для функции X:

$$\chi(X) - X\chi'(X) = \alpha.$$

Это уравнение можно решить численными методами.

При постоянном значении α для всех атомов X будет одно и то же, а радиус атома будет пропорционален $Z^{-1/3}$.

Если $\alpha = 1/Z$, то соответствующий радиус

$$\bar{R} \equiv R\left(\frac{1}{Z}\right) = Z^{-1/3} b X\left(\frac{1}{Z}\right)$$

является радиусом сферы, содержащей все электроны, кроме одного. На рис. 6 приведена зависимость $\bar{R}$ от Z. Заметим, что $\bar{R}$ практически не зависит от Z ($\bar{R} \approx (2-3)\cdot 10^{-8}$ *см*).

§ 14. Система нуклонов и изотопический спин

Рассмотрим систему из Z протонов и N нейтронов. Эта система описывается гамильтонианом H. Нейтроны и протоны являются подобными частицами, и для того чтобы различать их, мы припишем протонам номера от 1 до Z, а нейтронам номера от $Z+1$ до $Z+N \equiv \mathcal{N}$. Обозначим A_Z оператор антисимметризации первых Z частиц, а A_N — оператор антисимметризации N последних частиц. Мы будем придерживаться обозначений, введенных в §§ 2 — 4. Пусть

$$\varphi(q^{(1)}, q^{(2)}, \ldots, q^{(Z)}, q^{(Z+1)}, \ldots, q^{(\mathcal{N})})$$

— волновая функция, описывающая возможное состояние системы в симметрическом представлении $\{Q\}$. Функция φ

удовлетворяет условиям антисимметрии

$$A_N\Phi = \Phi, \quad A_Z\Phi = \Phi. \tag{70}$$

Для описания системы Z протонов и N нейтронов имеется и другой формализм, полностью эквивалентный предыдущему. В новом формализме нейтрон и протон рассматриваются как различные состояния одной и той же частицы — *нуклона*. Рассматриваемая система описывается тогда как система $\mathcal{N}$ нуклонов, из которых Z находятся в протонном состоянии, а N — в нейтронном. В этом случае $\mathcal{N}$ нуклонов являются тождественными фермионами, и состояния системы антисимметричны относительно перестановки этих $\mathcal{N}$ тождественных фермионов. Цель настоящего параграфа состоит в изложении этого формализма и в доказательстве его эквивалентности обычному.

Для того чтобы отличать состояние протона от состояния нейтрона, каждому нуклону следует приписать дополнительную динамическую переменную — заряд, принимающий два значения. Мы будем обозначать соответствующие состояния ω и ν, где ω описывает протонное состояние, а ν — нейтронное. Зарядовое пространство нуклона, так же как и спиновое, двумерно. Следовательно, мы можем определить в этом пространстве операторы, аналогичные операторам, введенным в случае спинового пространства, и имеющие те же математические свойства. Рассмотрим, в частности, три матрицы Паули. В представлении, в котором ω и ν являются базисными векторами, эти матрицы описывают в зарядовом пространстве векторный оператор $\boldsymbol{\tau} \equiv (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$, аналогичный вектору $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Вектор

$$\boldsymbol{t} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\tau} \tag{71}$$

является аналогом спина $\boldsymbol{s}$ и называется *изотопическим спином* нуклона. Мы видим, что

$$t_3\omega = \frac{1}{2}\tau_3\omega = \frac{1}{2}\omega, \quad t_3\nu = \frac{1}{2}\tau_3\nu = -\frac{1}{2}\nu.$$

Проекторы Π_ω и Π_ν на протонное и нейтронное состояния определяются формулами

$$\Pi_\omega = \frac{1}{2}(1 + \tau_3), \quad \Pi_\nu = \frac{1}{2}(1 - \tau_3), \tag{72}$$

а оператор заряда нуклона равен

$$e\Pi_\omega = \frac{1}{2}(1 + \tau_3)e.$$

Произведение $\mathcal{N}$ одночастичных зарядовых пространств является зарядовым пространством $\mathcal{E}_C$ системы $\mathcal{N}$ нуклонов.

Полный заряд системы представляется оператором

$$C \equiv \sum_{i=1}^{N} e\Pi_{\omega}^{(i)} = e\left(\frac{1}{2}\mathcal{N} + T_3\right), \tag{73}$$

где T_3 — третья компонента *полного изотопического спина*

$$\boldsymbol{T} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{t}^{(i)}. \tag{74}$$

Ортонормированный базис в $\mathscr{E}_C$ можно получить, рассмотрев всевозможные произведения из $\mathcal{N}$ ω- или ν-векторов. В частности, базисный вектор

$$\zeta = \omega^{(1)}\omega^{(2)} \ldots \omega^{(Z)}\nu^{(Z+1)} \ldots \nu^{(\mathcal{N})}$$

описывает состояние, в котором первые Z частиц — протоны, а последние N — нейтроны. В дальнейшем будем рассматривать только состояния с зарядом $C = Ze$, т. е. с

$$T_3 = \frac{1}{2}(Z - N).$$

Можно построить $(\mathcal{N}!/Z!N!)$ базисных векторов, соответствующих этому собственному значению. Типичный базисный вектор имеет вид

$$\zeta_\alpha = \omega^{(\alpha_1)}\omega^{(\alpha_2)} \ldots \omega^{(\alpha_Z)}\nu^{(\alpha_{Z+1})} \ldots \nu^{(\alpha_{\mathcal{N}})}$$

и описывает состояние, в котором Z частиц $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_Z$ являются протонами, а остальные — нейтронами.

Кет-векторы системы $\mathcal{N}$ нуклонов являются векторами пространства, которое можно представить в виде тензорного произведения пространства $\mathscr{E}_C$ и пространства $\mathscr{E}_0$ остальных динамических переменных. При перестановке $\mathcal{N}$ нуклонов осуществляется одна и та же перестановка как зарядовых переменных, так и остальных переменных. Если P_C описывает заданную перестановку зарядов, а P_0 — ту же перестановку остальных переменных, то полная перестановка описывается оператором

$$P = P_0 P_C.$$

Оператором антисимметризации системы $\mathcal{N}$ нуклонов будет оператор

$$A = \frac{1}{\mathcal{N}!}\sum_{P}(-1)^p P = \frac{1}{\mathcal{N}!}\sum (-1)^p P_0 P_C. \tag{75}$$

Состояния системы с полным зарядом Ze описываются векторами Φ пространства $\mathscr{E}_C \otimes \mathscr{E}_0$, удовлетворяющими условию

антисимметрии

$$A\Phi = \Phi \tag{76}$$

и уравнению

$$T_3\Phi = \tfrac{1}{2}(Z - N)\,\Phi. \tag{77}$$

Покажем теперь, что имеется взаимно однозначное соответствие между векторами Φ, для которых выполняются соотношения (76) и (77), и векторами φ из $\mathscr{E}_0$, удовлетворяющими условиям (70), а именно

$$|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathscr{N}!}{N!\,Z!}}\, A\,|\varphi\rangle\,|\zeta\rangle, \tag{78}$$

$$|\varphi\rangle = \sqrt{\frac{\mathscr{N}!}{N!\,Z!}}\, \langle\zeta\,|\Phi\rangle, \tag{79}$$

и что это соответствие сохраняет скалярное произведение.

Рассмотрим вектор $|\varphi\rangle$, удовлетворяющий условиям (70). Соответствующий ему вектор $|\Phi\rangle$, полученный по формуле (78), очевидно, удовлетворяет (76), а также и (77), поскольку T_3 коммутирует с A и $T_3|\zeta\rangle = {}^1/_2(Z - N)\,|\zeta\rangle$.

Покажем теперь, что частичное скалярное произведение в (79) определяет вектор $|\varphi\rangle$. Используя (75) и (78), имеем

$$\sqrt{\frac{\mathscr{N}!}{N!\,Z!}}\,\langle\zeta\,|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathscr{N}!}{N!\,Z!}}\,\langle\zeta\,|\,A\,|\Phi\rangle = \\ = \frac{1}{N!\,Z!}\sum_P (-1)^p\, P_0|\,\varphi\rangle\,\langle\zeta\,|\,P_C\,|\zeta\rangle. \tag{80}$$

Далее, $\mathscr{N}!$ перестановок можно разбить на две группы. В первую группу входят те перестановки F, которые меняют порядок первых Z частиц друг с другом и (или) переставляют последние N частиц между собой. Все $(N!Z!)$ перестановок F не изменяют вектор $|\zeta\rangle$ и домножают вектор $|\varphi\rangle$ на $(-1)^f$

$$\langle\zeta\,|\,F_C\,|\zeta\rangle = 1, \quad F_0|\,\varphi\rangle = (-1)^f\,|\,\varphi\rangle.$$

Перестановки G из второй группы переводят вектор ζ в другой вектор ζ_α и

$$\langle\zeta\,|\,G_C\,|\zeta\rangle = 0.$$

Следовательно, сумма в правой части равенства (80) имеет $(N!Z!)$ ненулевых слагаемых, каждое из которых равно $|\varphi\rangle$, что и дает доказываемое равенство (79).

Легко видеть, что соответствие (78) сохраняет скалярное произведение, ибо если $|\Phi\rangle$ и $|X\rangle$ соответствуют $|\varphi\rangle$ и $|\chi\rangle$, и

поскольку

$$|X\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\,A|\chi\rangle|\zeta\rangle,$$

а $|\Phi\rangle$ удовлетворяет уравнениям (76) и (78), то имеем

$$\langle X|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\,\langle\chi|\langle\zeta|\Phi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle.$$

Осталось показать, что соответствие взаимно однозначное. Пусть $|\Phi\rangle$ — вектор, удовлетворяющий условиям (76) и (77), а $|\varphi\rangle$ — вектор, построенный по формуле (79). В силу (77) $|\Phi\rangle$ является линейной комбинацией векторов $|\zeta_\alpha\rangle$ с векторами из $\mathscr{E}_0$ в качестве коэффициентов

$$|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle|\zeta_\alpha\rangle.$$

Вектор $|\varphi\rangle$ является коэффициентом при ζ в сумме, стоящей справа. Перестановка типа F, действуя на Φ, дает

$$F|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\sum_\alpha (F_0|\varphi_\alpha\rangle)(F_C|\zeta_\alpha\rangle), \tag{81}$$

а также

$$F|\Phi\rangle = (-1)^f|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\sum_\alpha (-1)^f|\varphi_\alpha\rangle|\zeta_\alpha\rangle. \tag{82}$$

Действие F_C на один из векторов $|\zeta_\alpha\rangle$ переводит его в другой вектор $|\zeta_\alpha\rangle$ и, в частности, оставляет $|\zeta\rangle$ инвариантным. Следовательно, коэффициент при $|\zeta\rangle$ в разложении $F|\Phi\rangle$ равен коэффициенту при $F_C|\zeta\rangle$ в правой части равенства (81). Приравняв его коэффициенту при $|\zeta\rangle$ в соотношении (82), находим

$$F_0|\varphi\rangle = (-1)^f|\varphi\rangle.$$

Это показывает, что вектор $|\varphi\rangle$, соответствующий $|\Phi\rangle$, действительно обладает свойством антисимметрии (70). ■

Каждое состояние системы Z протонов и N нейтронов, описываемое вектором $|\varphi\rangle$ в обычном формализме, в новом формализме описывается вектором $|\Phi\rangle$. Поскольку между этими векторами имеется сохраняющее скалярное произведение взаимно однозначное соответствие, то амплитуды вероятности, вычисленные по векторам нового формализма, совпадают с амплитудами, определенными векторами старого формализма. Это гарантирует эквивалентность двух формализмов. Если динамическая переменная представляется в обычном формализме оператором Q, то в новом формализме ей соответствует оператор $\hat{Q}$ в пространстве $\mathscr{E}_0 \otimes \mathscr{E}_C$; оператор $\hat{Q}$ симметричен относительно

$\mathcal{N}$ нуклонов, имеет тот же спектр собственных значений, что и Q, и его собственные состояния можно получить из собственных состояний оператора Q при помощи соотношения (78). $\hat{Q}$ является симметричным оператором, матричные элементы которого удовлетворяют уравнению

$$\langle X|\hat{Q}|\Phi\rangle = \langle\chi|Q|\varphi\rangle. \tag{83}$$

В качестве примера построим оператор $\hat{H}$, предполагая, что между нуклонами действуют только двухчастичные силы.

Гамильтониан имеет вид

$$H = K + V, \tag{84}$$

где K — полная кинетическая энергия. Если $k_p(\xi)$ и $k_n(\xi)$ — кинетическая энергия протона и нейтрона соответственно, то

$$K = K_p + K_n,$$

где

$$K_p = \sum_{i\leqslant Z} k_p^{(i)}, \quad K_n = \sum_{i>Z} k_n^{(i)}.$$

Полная потенциальная энергия V состоит из $^1/_2\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)$ членов, соответствующих взаимодействию двух частиц. Имеется $^1/_2Z(Z-1)$ членов взаимодействия протон — протон

$$V_{pp} = \sum_{i<j\leqslant Z} v_{pp}^{(ij)},$$

где $v_{pp}^{(ij)} \equiv v_{pp}(\xi^{(i)}, \xi^{(j)})$ — потенциал взаимодействия между протонами с номерами i и j. Аналогично имеется ZN членов взаимодействия протон — нейтрон

$$V_{pn} = \sum_{i\leqslant Z}\sum_{j>Z} v_{pn}^{(ij)}$$

и $^1/_2N(N-1)$ членов взаимодействия нейтрон — нейтрон

$$V_{nn} = \sum_{j>i>Z} v_{nn}^{(ij)}.$$

Следовательно, полная потенциальная энергия есть

$$V = V_{pp} + V_{pn} + V_{nn}.$$

Оператор $\hat{K}$, соответствующий K, имеет вид

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^{N} (k_p^{(i)}\Pi_\omega^{(i)} + k_n^{(i)}\Pi_\nu^{(i)}). \tag{85}$$

Он симметричен и коммутирует с A. Для того чтобы показать, что $\hat{K}$ удовлетворяет равенству (83), учтем определение векторов $|\Phi\rangle$ и $|X\rangle$ и проекторов Π_ω и Π_ν

$$\frac{N!\,Z!}{\mathcal{N}!}\langle X|\hat{K}|\Phi\rangle = \langle\chi\zeta|A\hat{K}A|\varphi\zeta\rangle = \langle\chi\zeta|\hat{K}A|\varphi\zeta\rangle = \langle\chi\zeta|KA|\varphi\zeta\rangle,$$

откуда

$$\langle X|\hat{K}|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\,\langle\chi\zeta|K|\Phi\rangle.$$

Поскольку K не действует на зарядовые переменные, частичное скалярное произведение $\langle\zeta|K|\Phi\rangle$ равно результату действия K на $\langle\zeta|\Phi\rangle$. Используя (79), находим

$$\langle X|\hat{K}|\Phi\rangle = \langle\chi|K|\varphi\rangle.$$

Точно так же оператор, соответствующий V, имеет вид

$$\hat{V} = \hat{V}_{pp} + \hat{V}_{pn} + \hat{V}_{nn}, \tag{86}$$

где

$$\hat{V}_{pp} = \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v_{pp}^{(ij)}\Pi_{\omega}^{(i)}\Pi_{\omega}^{(j)}, \tag{86а}$$

$$\hat{V}_{pn} = \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v_{pn}^{(ij)}\left[\Pi_{\omega}^{(i)}\Pi_{\nu}^{(j)} + \Pi_{\nu}^{(i)}\Pi_{\omega}^{(j)}\right], \tag{86б}$$

$$\hat{V}_{nn} = \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v_{nn}^{(ij)}\Pi_{\nu}^{(i)}\Pi_{\nu}^{(j)}. \tag{86в}$$

Тем же методом, что и в случае $\hat{K}$, можно проверить, что $\hat{V}$ обладает требуемыми свойствами.

Приведенная для случая протонов и нейтронов теория применима и к системам, содержащим более двух типов фермионов. Рассмотрим систему, содержащую r типов подобных, но различимых фермионов: n_1 фермионов типа 1, n_2 фермионов типа 2, ..., n_r фермионов типа r. Вместо того чтобы рассматривать фермионы различных типов как разные частицы, эти r типов фермионов можно рассматривать как r различных состояний, $|1\rangle$, $|2\rangle$, ..., $|r\rangle$ одного и того же фермиона и рассматривать систему, состоящую из $n_1 + n_2 + \ldots + n_r$ фермионов одного типа, из которых n_1 находится в состоянии $|1\rangle$, n_2 — в состоянии $|2\rangle$, ..., n_r — в состоянии $|r\rangle$. Эквивалентность получаемого таким образом «изотопического» формализма стандартному можно показать, используя те же методы, что и в случае системы нуклонов. Все эти замечания применимы и для бозонных систем, если всюду операцию антисимметризации заменить на операцию симметризации (задача 9).

§ 15. Использование изотопического спина. Зарядовая независимость

Рассмотрим систему из $\mathcal{N}$ нуклонов. До тех пор пока рассматриваются системы с определенным числом Z протонов и N нейтронов, *a priori* проще рассматривать протоны и нейтроны как различные частицы (обычный формализм), нежели описы-

вать их как нуклоны, которые могут находиться в различных зарядовых состояниях (формализм изотопического спина).

С другой стороны, когда рассматриваются явления, в которых заряд ядра не сохраняется, формализм изотопического спина неизбежен. Классический пример дает β-распад. При распаде β^--радиоактивных ядер число нуклонов остается постоянным, но один из нейтронов преобразуется в протон. В теории этого явления ядра рассматриваются как системы, состоящие из $\mathcal{N}$ нуклонов, находящихся во взаимодействии с квантованными полями электронов и нейтрино. Теория β-распада лежит вне рамок этой книги, и мы упомянули ее лишь в качестве примера.

Особо важное значение формализма изотопического спина обусловлено тем, что ядерные реакции практически не зависят от нуклонного заряда.

Массы нейтрона и протона совпадают с погрешностью, меньшей чем 0,2% и, следовательно, кинетическая энергия нуклона практически не зависит от его заряда

$$k_p = k_n = k. \tag{87}$$

Нуклон-нуклонный потенциал также почти не зависит от заряда, и до тех пор, пока допустимо пренебрежение электромагнитными взаимодействиями [1]), можно считать

$$v_{pp} = v_{pn} = v_{nn} = v. \tag{88}$$

Мы собираемся рассмотреть следствия зарядовой независимости в предположении, что между нуклонами действуют только двухчастичные силы [2]).

В обычном формализме гипотеза зарядовой независимости находит свое выражение в двух следующих свойствах гамильтониана H:

(i) H не зависит ни от Z, ни от N, а зависит лишь от полного числа нуклонов $\mathcal{N}$;

(ii) H симметричен относительно перестановок всех частиц, а не только относительно перестановок друг с другом отдельно протонов и (или) отдельно нейтронов.

---

[1]) Электромагнитные эффекты становятся преобладающими только при достаточно больших расстояниях между нуклонами ($\gg 10^{-13}$ *см*). На больших расстояниях v_{pn} и v_{nn} практически равны нулю, а v_{pp} становится просто кулоновским отталкиванием двух протонов. Обсуждение экспериментальных данных, подтверждающих гипотезу зарядовой независимости, имеется в монографии: *Дж. Блатт, В. Вайскопф* (см. сноску к § XIII. 33) и в работе *D. H. Wilkinson*. Phil. Mag. **1**, 1031 (1956).

[2]) Для доказательства эквивалентности зарядовой независимости и свойства инвариантности (91) в этом ограничении нет необходимости. Эта эквивалентность может быть доказана в общем случае применением теоремы из § 18 Дополнения Г.

Эти свойства непосредственно следуют из (87) и (88), ибо если эти соотношения выполняются, то гамильтониан (84) принимает вид

$$H = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} k^{(i)} + \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v^{(ij)}, \tag{89}$$

где $\sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}}$ означает, как и в соотношениях (86а, б, в), суммирование по всем $\frac{1}{2}\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)$ парам (ij) из множества $\mathcal{N}$ частиц.

В формализме изотопического спина гипотеза зарядовой независимости отражается в независимости гамильтониана $\hat{H}$ от зарядовых переменных, так что выполняется равенство

$$\hat{H} = H, \tag{90}$$

где H в правой части следует рассматривать как оператор в пространстве $\mathscr{E}_0 \otimes \mathscr{E}_C$. Это можно показать, либо используя определение (83) операторов в формализме изотопического спина, либо непосредственно вычисляя выражения (85) и (86) для $\hat{K}$ и $\hat{V}$, предполагая выполненными соотношения (87) и (88). Последняя процедура дает для $\hat{V}$ выражение

$$\hat{V} = \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v^{(ij)}[\Pi_\omega^{(i)}\Pi_\omega^{(j)} + \Pi_\omega^{(i)}\Pi_\nu^{(j)} + \Pi_\nu^{(i)}\Pi_\omega^{(j)} + \Pi_\nu^{(i)}\Pi_\nu^{(j)}],$$

и так как

$$\Pi_\omega^{(i)} + \Pi_\nu^{(i)} = 1,$$

то

$$\hat{V} = \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v^{(ij)} = V.$$

Поскольку $\hat{H}$ не зависит от зарядовых переменных, то он коммутирует с каждой из трех компонент полного изотопического спина

$$[\hat{H}, \boldsymbol{T}] = 0. \tag{91}$$

Покажем теперь, что справедливо и обратное утверждение, т. е. что гамильтониан $\hat{H}$, удовлетворяющий соотношению (91), можно записать в виде оператора, не зависящего от зарядовых переменных.

С другой стороны, $\hat{H}$ является некоторой функцией от обычных переменных ξ и зарядовых переменных τ каждой из частиц. В виду предположения о характере сил, действующих между частицами, эта функция имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \hat{k}^{(i)} + \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} \hat{v}^{(ij)},$$

где $\hat{k}^{(i)}$ зависит лишь от переменных с номером i, а $\hat{v}^{(ij)}$ — от переменных с номерами i и j. Однако изотопический спин обладает теми же математическими свойствами, что и обычный спин и, в частности, компоненты векторов $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ имеют те же свойства, что и матрицы Паули. Это выражается в том (см. ур. (78, 79)), что любая функция $\hat{H}$ от $\boldsymbol{\tau}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{\tau}^{(\mathcal{N})}$ может быть представлена в виде линейной комбинации этих операторов. Поскольку H коммутирует с $\boldsymbol{T}$, то он инвариантен также и относительно вращений в $\mathscr{E}_C$, и, следовательно, является скалярной функцией векторов $\boldsymbol{\tau}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{\tau}^{(\mathcal{N})}$. Итак, $\hat{k}^{(i)}$ является линейной скалярной функцией от $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ и, следовательно, не зависит от $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$, тогда как $\hat{v}^{(ij)}$, будучи линейной скалярной функцией от $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ и $\boldsymbol{\tau}^{(j)}$, имеет вид

$$\hat{v}^{(ij)} = a^{(ij)} + (\boldsymbol{\tau}^{(i)}\boldsymbol{\tau}^{(j)})\, b^{(ij)},$$

где $a^{(ij)}$ и $b^{(ij)}$ — функции только от орбитальных и спиновых переменных. Для завершения доказательства необходимо показать, что действие $(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\boldsymbol{\tau}^{(j)})$ на *антисимметричные* векторы пространства $\mathscr{E}_0 \otimes \mathscr{E}_C$ совпадает с действием на эти векторы оператора, затрагивающего только переменные из $\mathscr{E}_0$. Произведение $(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\boldsymbol{\tau}^{(j)})$ связано с оператором $P_C^{(ij)}$, описывающим транспозицию (ij) в зарядовом пространстве, соотношением Дирака

$$P_C^{(ij)} = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\tau}^{(i)}\boldsymbol{\tau}^{(j)}). \tag{92}$$

Для доказательства равенства (92) введем изотопический спин пары (ij):

$$\boldsymbol{t}_{ij} = \boldsymbol{t}^{(i)} + \boldsymbol{t}^{(j)}.$$

Любое состояние в зарядовом пространстве является суммой состояния $|1\rangle$, для которого $t_{ij} = 1$ и состояния $|0\rangle$, для которого $t_{ij} = 0$. Каждое триплетное состояние симметрично, а каждое синглетное — антисимметрично по переменным i и j. Таким образом,

$$\boldsymbol{t}_{ij}^2|1\rangle = 2|1\rangle, \quad \boldsymbol{t}_{ij}^2|0\rangle = 0,$$
$$P_C^{(ij)}|1\rangle = |1\rangle, \quad P_C^{(ij)}|0\rangle = -|0\rangle,$$

и, следовательно,

$$P_C^{(ij)} = \boldsymbol{t}_{ij}^2 - 1.$$

Отсюда с учетом тождества

$$\boldsymbol{t}_{ij}^2 = \frac{1}{2}(3 + \boldsymbol{\tau}^{(i)}\boldsymbol{\tau}^{(j)})$$

получаем (92). Итак, мы имеем

$$\boldsymbol{\tau}^{(i)}\boldsymbol{\tau}^{(j)} = 2P_C^{(ij)} - 1.$$

Однако в пространстве антисимметричных векторов в $\mathscr{E}_0 \otimes \mathscr{E}_C$

$$P^{(ij)} \equiv P_C^{(ij)} P_0^{(ij)} = -1.$$

Тогда

$$P_C^{(ij)} = -P_0^{(ij)},$$

и оператор $\tau^{(i)}\tau^{(j)}$ может быть заменен на выражение

$$-2P_0^{(ij)} - 1,$$

действующее только на переменные обычного пространства. ■

Эквивалентность зарядовой независимости и вращательной инвариантности в зарядовом пространстве имеет общий характер [1]). Поскольку все *математические* результаты, относящиеся к вращениям (сложение изотопических спинов, теорема Вигнера — Эккарта, правила отбора, и т. д.), справедливы и в частном случае вращений в зарядовом пространстве, то указанная эквивалентность обеспечивает удобный метод учета зарядовой независимости ядерных сил.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Оператор P, описывающий перестановку p N подобных частиц, определен в § 2 действием на базисные векторы заданного симметричного представления $\{Q\}$. Показать, что это определение не зависит от выбранного представления.

2. Обозначим S_n, A_n операторы симметризации и антисимметризации для частиц 1, 2, ..., n, а S_{n-1}, A_{n-1} — операторы симметризации и антисимметризации частиц 1, 2, ..., $n-1$. Показать, что

$$S_n = \frac{1}{n}\left[1 + \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right] S_{n-1} = \frac{1}{n} S_{n-1}\left[1 + \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right],$$

$$A_n = \frac{1}{n}\left[1 - \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right] A_{n-1} = \frac{1}{n} A_{n-1}\left[1 - \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right].$$

3. Показать, что в множестве *симметричных* наблюдаемых системы N подобных частиц имеется полный набор коммутирующих наблюдаемых только в случае, когда $N = 2$.

4. Найти сечение протон — протонного рассеяния (в системе центра масс) в случае, когда налетающий протон полностью поляризован в заданном направлении Ou (компонента спина по оси Ou равна $+1/2$), а протон мишени: (i) полностью поляризован в том же направлении; (ii) полностью поляризован в противоположном направлении (компонента спина по оси Ou равна

[1]) См. сноску [2] на стр. 125.

$-1/2$; (iii) не поляризован. Сравнить выражение (56) с теми, которые получатся в этих трех случаях.

5. Выражение (56) дает сечение рассеяния двух фермионов со спином $1/2$ и взаимодействием, не зависящим от спина. Как изменится это выражение в случае, когда две сталкивающиеся тождественные частицы будут: (i) фермионами со спином j; (ii) бозонами со спином j?

6. Вычислить среднее значение $\langle r\rangle$ расстояния от начала координат до каждого из электронов в модели атома Томаса — Ферми и сравнить с числовым значением $\langle r\rangle$ для атома водорода (использовать интеграл $\int_0^\infty \chi(x)\,dx \approx 1{,}8$).

7. Атом с атомным числом Z ионизирован p раз. Используя модель Томаса — Ферми, вычислить электронную плотность $\rho(r)$. Показать, что выражение (66) для $\rho(r)$ справедливо при тех же определениях b и x, что и в § 13 (ур. (64—65)) и что функция $\chi(x)$, встречающаяся в этом выражении, является решением уравнения (67), обращающимся в нуль в некоторой точке x_0 интервала $(0, \infty)$, и удовлетворяет условиям

$$\chi(0) = 1, \quad \chi'(x_0) = -p/Zx_0.$$

Исследовать общий характер поведения кривой $\rho(r)$ и электростатического потенциала $\Phi(r)$.

8. Рассмотреть систему Z электронов с гамильтонианом, не зависящим от спинов. Показать, что спектр энергии состояний, имеющих определенное значение M компоненты S_z полного спина, совпадает (то же положение и то же вырождение уровней) со спектром, который может быть получен, если электроны со спином $1/2$ и со спином $-1/2$ рассматривать как фермионы разных типов и определять состояния в которых $(1/2Z + M)$ первых электронов имеют спин $1/2$, а остальные спин $-1/2$.

9. Построить «изотопический» формализм, определенный в § 14, для системы, содержащей $\mathcal{N}$ фермионов r подобных, но различных типов, а именно: n_1 фермионов типа 1, n_2 фермионов типа 2, ..., n_r фермионов типа r $(n_1 + n_2 + \ldots + n_r = \mathcal{N})$. Как следует модифицировать этот формализм, если частицы будут бозонами, а не фермионами?

ГЛАВА XV[1]

ИНВАРИАНТНОСТЬ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ. ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ

§ 1. Введение

В данной главе систематически исследуются свойства инвариантности уравнений движения физической системы относительно некоторых преобразований. Изучаются выводы, которые можно сделать о поведении физической системы на основании этих свойств инвариантности.

Вспомогательные математические сведения приведены в разделе I.

В разделе II изучаются общие свойства преобразований и групп преобразований. Каждому преобразованию $\mathcal{T}$ переменных и динамических состояний будет сопоставлен оператор T, действующий на кет-векторы, описывающие состояния. Оператор T — либо *линейный унитарный*, либо *антилинейный унитарный* и определен с точностью до произвольного фазового множителя законами преобразования основных наблюдаемых системы.

Как правило, в физических приложениях оператор T линеен за исключением оператора обращения времени. Различные преобразования, встречающиеся в физике, образуют определенные группы преобразований. Каждой такой группе $\mathcal{G}$ сопоставляется группа G операторов, реализующих эти преобразования[2]. После краткого обзора наиболее важных из этих групп мы продемонстрируем на простых примерах методы построения G в случае, когда группа $\mathcal{G}$ конечная, и в случае, когда $\mathcal{G}$ — непрерывная группа, конечные преобразования которой могут быть определены как последовательность инфинитезимальных преобразований.

Вопросы, специфически относящиеся к инвариантности, разбираются в разделе III. Преобразования этого раздела не за-

---

[1]) Четвертая часть (гл. XVI—XIX), за исключением нескольких специально отмеченных мест, которые могут быть опущены при первом чтении, не зависит от настоящей главы, и последующие главы при желании можно изучать в первую очередь.

[2]) Используемые в этой главе понятия, относящиеся к группам и их представлениям, приведены в разделах I и II Дополнения Г.

висят от времени и линейны, а полученные результаты являются простыми обобщениями тех, которые были получены ранее (гл. XIII) для вращений. Инвариантность уравнений движения динамических состояний относительно преобразований некоторой группы $\mathcal{G}$ эквивалентна предположению о том, что гамильтониан H коммутирует с операторами группы G. Таким образом, любая наблюдаемая, образованная из операторов группы G, является интегралом движения, так что из G-инвариантности следует существование законов сохранения. Учет свойств симметрии гамильтониана H позволяет упростить процедуру его диагонализации и сделать ряд предсказаний о наличии и характере вырождения его собственных значений.

Инвариантность относительно обращения времени выделяется как своим физическим значением, так и тем обстоятельством, что соответствующий ей оператор антилинеен. Эта инвариантность обсуждается в разделе IV. Изложенный в этой главе материал проясняет удивительную аналогию, имеющуюся между классической и квантовой механиками в определении преобразований, в связи свойств инвариантности уравнений движения, симметрий гамильтониана и в существовании законов сохранения.

Раздел I. ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ. АНТИЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

§ 2. Три полезные теоремы

Теорема I. Справедливость соотношения

$$\langle u|A|u\rangle = \langle u|B|u\rangle \text{ при всех } |u\rangle$$

является необходимым и достаточным условием равенства двух линейных операторов A и B.

Теорема II. Необходимое и достаточное условие совпадения с точностью до фазового множителя двух линейных операторов A и B

$$A = Be^{i\alpha} \tag{1}$$

состоит в справедливости равенства

$$|\langle u|A|v\rangle| = |\langle u|B|v\rangle| \text{ для всех } |u\rangle \text{ и } |v\rangle. \tag{2}$$

Теорема III. Если между векторами пространства $\mathcal{E}$ существует взаимно однозначное соответствие $\mathcal{T}$, определенное с точностью до произвольного постоянного фазового множителя и сохраняющее модуль скалярного произведения, то фазовые множители всегда можно выбрать таким образом, чтобы $\mathcal{T}$ было либо линейным унитарным, либо антилинейным унитарным.

Теорема I доказана в главе VII (§ 5). Она приведена здесь только для полноты изложения.

В теореме II условие (2) очевидно следует из (1). Для доказательства обратного утверждения выберем конкретное представление, в котором обозначим A_{ij} и B_{ij} матричные элементы операторов A и B соответственно. Поскольку для базисных векторов представления условие (2) справедливо, то

$$|A_{ij}|=|B_{ij}| \text{ при всех } i \text{ и } j. \tag{3}$$

Считая, что $|u\rangle$ — i-й элемент базиса, а $|v\rangle$ — линейная комбинация j-го и k-го базисных векторов, мы получим аналогично

$$|A_{ij}x_j + A_{ik}x_k| = |B_{ij}x_j + B_{ik}x_k|$$

для всех значений комплексных коэффициентов x_j и x_k. Учитывая (3), можно переписать последнее равенство в виде

$$\operatorname{Re}[x_j x_k^* (A_{ij}A_{ik}^* - B_{ij}B_{ik}^*)] = 0.$$

Для справедливости этого равенства при всех $x_j x_k^*$, необходимо выполнение условия

$$A_{ij}A_{ik}^* - B_{ij}B_{ik}^* = 0.$$

Полученное соотношение с учетом (3) дает

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \frac{A_{ik}}{B_{ik}}. \tag{4}$$

При заданном i те же рассуждения можно применить к различным индексам столбцов j и k, что показывает независимость отношения A_{ij}/B_{ij} от j. Переставив местами строки и столбцы, мы можем повторить доказательство и показать, что отношение не зависит также и от i. Поскольку (3) означает равенство матричных элементов A и B по абсолютной величине, то модуль рассматриваемого отношения должен быть равен единице и

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = e^{i\alpha} \text{ при всех } i \text{ и } j.$$

Иными словами, операторы A и B совпадают с точностью до фазы $e^{i\alpha}$. ■

Рассмотрим теперь теорему III. По предположению каждому вектору $|u\rangle$ из $\mathscr{E}$ отображение $\mathscr{T}$ сопоставляет вектор $|u'\rangle$. Этот вектор определен с точностью до фазового множителя. Осуществим конкретный выбор значения фазы у каждого из векторов $|u'\rangle$. Тогда отображение $\mathscr{T}$ устанавливает взаимно однозначное соответствие между векторами из $\mathscr{E}$

$$|u'\rangle = \mathscr{T}[|u\rangle], \quad |u\rangle = \mathscr{T}^{-1}[|u'\rangle], \tag{I}$$

сохраняющее модуль скалярного произведения

$$|\langle u'|v'\rangle| = |\langle u|v\rangle|. \tag{II}$$

Пусть векторы

$$|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle, \ldots \tag{5}$$

образуют полное ортонормированное множество векторов в $\mathscr{E}$. Соответствующее ему множество

$$|1'\rangle, |2'\rangle, \ldots, |n'\rangle, \ldots \tag{5'}$$

также является полным и ортонормированным. Его ортонормированность следует из того, что в силу (II) $\mathscr{T}$ сохраняет нормировку и ортогональность. Полнота следует из того, что если существует вектор $|a'\rangle$, ортогональный всем векторам (5'), то вектор $|a\rangle \equiv \mathscr{T}^{-1}[|a'\rangle]$ будет ортогонален всем векторам (5), что противоречит предположению о полноте системы (5).

Обозначим

$$u_n \equiv \langle n|u\rangle, \quad u'_n \equiv \langle n'|u'\rangle. \tag{6}$$

Мы собираемся показать, что при соответствующем выборе фаз для «штрихованных» кет-векторов справедливо одно из приводимых ниже соотношений:

$$u'_n = u_n \quad \text{при всех } |u\rangle \text{ и } n, \tag{7а}$$

$$u'_n = u^*_n \quad \text{при всех } |u\rangle \text{ и } n. \tag{7б}$$

Заметим, что условие (II) означает

$$|u'_n| = |u_n| \quad \text{при всех } |u\rangle \text{ и } n.$$

Таким образом, нам следует изучить только фазовые соотношения между u'_n и u_n.

С этой целью зафиксируем фазу каждого из базисных кет-векторов $|n'\rangle$, требуя, чтобы вектору $|1'\rangle + |n'\rangle$ соответствовал вектор $|1\rangle + |n\rangle$.

Докажем сперва соотношения (7), предполагая, что $|u\rangle$ — «вещественный» кет-вектор, т. е. когда все u_n вещественны. Применив условие (II) к скалярному произведению векторов $|u\rangle$ и $|1\rangle + |n\rangle$, имеем

$$|u_1 + u_n| = |u'_1 + u'_n|.$$

Выбрав фазу вектора $|u'\rangle$ так, чтобы $u'_1 = u_1$, получим требуемый результат, $u'_n = u_n$. Приведенное рассуждение неприменимо к случаю, когда $u_1 = 0$. Однако можно изменить аргументацию так, чтобы включить в рассмотрение и этот случай. Поскольку такое расширение очевидно, мы не будем приводить его.

Рассмотрим теперь произвольный кет-вектор $|u\rangle$. Применив условие (II) к скалярному произведению $|u\rangle$ с «вещественным» кет-вектором $|j\rangle + |j+1\rangle + \ldots + |j+k\rangle$, получаем

$$\left|\sum_{s=0}^{k} u_{j+s}\right| = \left|\sum_{s=0}^{k} u'_{j+s}\right|, \tag{8}$$

что справедливо при любом выборе j и s. Для того чтобы этот результат стал более наглядным, удобно использовать следующую геометрическую интерпретацию векторов $|u\rangle$ и $|u'\rangle$. Сопоставим вектору $|u\rangle$ ломаную линию (Г), полученную путем совмещения концов векторов комплексной плоскости, описывающих последовательные компоненты $u_1, u_2, \ldots, u_n, \ldots$. Аналогично $|u'\rangle$ описывается ломаной линией (Г'), построенной из векторов, представляющих $u'_1, u'_2, \ldots, u'_n, \ldots$. Соотношение (8) означает тогда, что расстояние между двумя любыми вершинами ломаной (Г) совпадает с расстоянием между двумя соответствующими вершинами ломаной (Г'). Как следствие: а) либо (Г) можно совместить с (Г') поворотом; б) либо (Г) можно совместить с (Г') поворотом и отражением относительно вещественной оси.

В случае а) выберем фазу $|u'\rangle$, требуя $u'_1 = u_1$. При таком выборе (Г) и (Г') совпадают, т. е.

$$u'_n = u_n \text{ при всех } n.$$

В случае б) наш выбор фазы таков, что $u'_1 = u_1^*$. В этом случае (Г') является зеркальным отражением ломаной (Г) относительно вещественной оси, т. е.

$$u'_n = u_n^* \text{ при всех } n.$$

Наконец, мы должны показать, что в действительности имеются лишь эти две возможности: либо все кет-векторы соответствуют случаю а), либо они все соответствуют случаю б).

Будем предполагать для конкретности, что заданный вектор $|j\rangle + e^{i\alpha}|k\rangle$ ($\alpha \neq n\pi$) соответствует случаю а). Тогда всякий вектор $|u\rangle$, компоненты u_j и u_k которого не обращаются в нуль и имеют относительную фазу, отличную от $n\pi$, также соответствует случаю а), что легко получить применением условия (II) к скалярному произведению $|u\rangle$ с $|j\rangle + e^{i\alpha}|k\rangle$. Эти рассуждения могут быть применены и к векторам, компоненты u_j, u_k которых обращаются в нуль, либо имеют относительную фазу, равную $n\pi$. Те же аргументы переносятся и на случай б).

В результате получаем две возможности:

Случай а). При подходящем выборе фаз применимо соотношение (7а). В этом случае соответствие $\mathcal{T}$ очевидно

является линейным. Более точно, справедливо равенство

$$\langle u' \mid v' \rangle = \langle u \mid v \rangle, \tag{9а}$$

означающее, что $\mathcal{T}$ — линейный унитарный оператор.

Случай б). При подходящем выборе фаз применимо соотношение (7б). Отображение $\mathcal{T}$, очевидно, антилинейно.

В этом случае имеем

$$\langle u' \mid v' \rangle = \langle u \mid v \rangle^*. \tag{9б}$$

В соответствии с определением понятия унитарности для антилинейных операторов, которое приведено ниже, $\mathcal{T}$ является унитарным антилинейным оператором. ■

§ 3. Антилинейные операторы в гильбертовом пространстве

Свойства антилинейных операторов в гильбертовом пространстве аналогичны свойствам линейных операторов. Мы кратко опишем их в том же порядке, в котором в главе VII приведены свойства линейных операторов.

Определение. Действие на кет-векторы. Если каждому кет-вектору $|u\rangle$ в гильбертовом пространстве сопоставлен некоторый кет-вектор $|v\rangle$ и если это соответствие антилинейно, то мы говорим, что $|v\rangle$ является результатом действия на $|u\rangle$ некоторого антилинейного оператора A

$$|v\rangle = A|u\rangle. \tag{10}$$

Свойство антилинейности можно записать в виде

$$A(\lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle) = \lambda_1^*(A|1\rangle) + \lambda_2^*(A|2\rangle). \tag{11}$$

Антилинейный оператор определяется своим действием на каждый из векторов полного набора линейно независимых векторов в $\mathcal{E}$ и, в частности, своим действием на элементы базиса в $\mathcal{E}$.

Алгебраические операции. Алгебраические операции определяются так же, как и в случае линейных операторов.

(i) Умножение на константу c. Если $c \neq c^*$, то следует отметить, что $Ac \neq cA$; справедливо равенство

$$cA = Ac^*. \tag{12}$$

(ii) Сумма двух антилинейных операторов определяется точно так же, как и сумма линейных операторов.

(iii) Произведения: если A_1, A_2 — антилинейные операторы, то произведение A_1A_2, определенное формулой

$$(A_1A_2)|u\rangle = A_1(A_2|u\rangle),$$

является линейным оператором. Если A — антилинейный оператор, а B — линейный, то их произведение AB антилинейно. В более общем случае, если набор $A, B, \ldots, L$ содержит $p+q$ операторов, из которых p линейных, а q антилинейных, то произведение $(AB \ldots L)$ линейно или антилинейно в соответствии с четностью или нечетностью q.

Описанные произведения все ассоциативны, но в общем случае не коммутативны. Определение коммутаторов совпадает с их определением в случае линейных операторов, и справедливы все обычные алгебраические правила (V. 63) — (V. 66).

Обратный оператор. Если соответствие (10) между векторами $|u\rangle$ и $|v\rangle$ взаимно однозначно, то оно определяет также и оператор A^{-1}, обратный оператору A

$$|u\rangle = A^{-1}|v\rangle.$$

По определению, два антилинейных оператора A и B являются обратными друг к другу, если одновременно выполняются соотношения

$$AB = 1, \quad BA = 1. \tag{13}$$

Если каждый из операторов $A, B, C, \ldots, L$ является либо линейным, либо антилинейным и если каждый из этих операторов имеет обратный, то оператор, обратный их произведению, существует и определяется формулой

$$(ABC \ldots L)^{-1} = L^{-1} \ldots C^{-1}B^{-1}A^{-1}. \tag{14}$$

Действие на бра-векторы. Пусть A антилинейный оператор, а $\langle\chi|$ — бра-вектор. Величина, комплексно сопряженная к скалярному произведению $\langle\chi|(A|u\rangle)$, будучи линейной функцией от $|u\rangle$ определяет некоторый бра-вектор (ср. § VII. 3), который мы обозначим $\langle\eta|$. По определению,

$$\langle\eta| = \langle\chi|A. \tag{15}$$

Соответствие между $\langle\chi|$ и $\langle\eta|$ антилинейно

$$(\lambda_1\langle 1| + \lambda_2\langle 2|)A = \lambda_1^*(\langle 1|A) + \lambda_2^*(\langle 2|A). \tag{16}$$

Из этого определения следует справедливость равенства

$$(\langle\chi|A)|u\rangle = [\langle\chi|(A|u\rangle)]^*. \tag{17}$$

Полученное соотношение полезно сравнить с аналогичным соотношением (VII. 17) для линейных операторов. Следует учесть, однако, что в антилинейном случае скобки опустить нельзя.

Для определения трех указанных выше алгебраических операций и действия обратного оператора на бра-векторы мы поступим точно так же, как и в случае линейных операторов.

Умножение на постоянную c имеет вид (ср. ур. (12)):

$$\langle\chi|(cA) = c^*(\langle\chi|A) = \langle\chi|(Ac^*). \tag{18}$$

Остальные определения переносятся без изменения.

Важное замечание. Соотношения (12) и (17) показывают различия в определении обычных линейных операций и операций, содержащих антилинейные операторы:

(i) рассматриваемая как оператор, действующий в кет-пространстве или бра-пространстве, постоянная c не коммутирует с антилинейными операторами, кроме случая, когда эта постоянная вещественна;

(ii) в скалярном произведении надо четко указывать, действует ли антилинейный оператор A на кет-вектор, стоящий справа от него, или на бра-вектор, стоящий слева.

В практических расчетах скобки используются в той степени, в которой они необходимы для исключения каких-либо сомнений, связанных со значением используемых символов. Рассмотрим, например, произведение A_1A_2 двух антилинейных операторов. Символ $\langle u|A_1A_2|v\rangle$ является неопределенным, тогда как символ

$$\begin{aligned}\langle u|(A_1A_2)|v\rangle = (\langle u|A_1A_2)|v\rangle = [(\langle u|A_1)(A_2|v\rangle)]^* = \\ = \langle u|(A_1A_2|v\rangle)\end{aligned} \tag{19}$$

не вызывает никаких недоразумений. Аналогично при рассмотрении произведения $(A|u\rangle\langle v|)$ линейного оператора $|u\rangle\langle v|$ и антилинейного оператора A запись $A|u\rangle\langle v|w\rangle$ и $\langle w|A|u\rangle\langle v|$ непонятна, тогда как без каких-либо недоразумений можно использовать запись

$$(A|u\rangle\langle v|)|w\rangle = A(|u\rangle\langle v|w\rangle) = (A|u\rangle)\langle v|w\rangle^* \tag{20}$$

и

$$\langle w|(A|u\rangle\langle v|) = (\langle w|A)|u\rangle\langle v| = [\langle w|(A|u\rangle)]^*\langle v|. \tag{21}$$

§ 4. Антиунитарные преобразования

Сопряжение (или эрмитово сопряжение) антилинейных операторов. Оператор $A^\dagger$ является, по определению, сопряженным оператором к антилинейному оператору A, если $A^\dagger|u\rangle$ является кет-вектором, сопряженным к $\langle u|A$ при любом $|u\rangle$. Этот оператор антилинеен.

Из сказанного следует, что для любых кет-векторов $|u\rangle$ и $|t\rangle$

$$\langle t|(A^\dagger|u\rangle) \equiv \langle u|(A|t\rangle). \tag{22}$$

Это тождество следует сравнить с (VII. 20). Помимо этого равенства, все свойства, установленные в § VII. 7, могут быть перенесены на рассматриваемый случай без изменений.

В частности, если каждый из операторов $A, B, C, \ldots, L$ является либо линейным, либо антилинейным, то (ср. ур. (14))

$$(ABC \ldots L)^{\dagger} = L^{\dagger} \ldots C^{\dagger} B^{\dagger} A^{\dagger}. \tag{23}$$

Антиунитарный оператор. Оператор A называется антиунитарным, если он антилинеен и если $A^{-1} = A^{\dagger}$

$$AA^{\dagger} = A^{\dagger}A = 1.$$

Если в наборе $A, B, C, \ldots, L$ $(p + q)$ операторов имеется p унитарных и q антиунитарных, то произведение $ABC \ldots L$ унитарно или антиунитарно в соответствии с четностью или нечетностью q.

Антиунитарные преобразования линейных операторов и векторов. Антиунитарный оператор K определяет антиунитарное преобразование векторов и линейных операторов в $\mathscr{E}$, при котором:

любой кет-вектор $|u\rangle$ переходит в $|\hat{u}\rangle \equiv K|u\rangle$;

любой линейный оператор B переходит в $\hat{B} \equiv KBK^{\dagger}$;

любой бра-вектор $\langle v|$ переходит в $\langle \hat{v}| \equiv \langle v|K^{\dagger}$.

При таком преобразовании;

(i) сохраняется отношение сопряженности бра- и кет-векторов и отношение эрмитовой сопряженности операторов. Если B является наблюдаемой, то $\hat{B}$ — также наблюдаемая с тем же спектром собственных значений, а подпространство, соответствующее каждому из собственных значений оператора B, переходит в подпространство, соответствующее тому же собственному значению оператора $\hat{B}$;

(ii) скалярные произведения переходят в комплексно сопряженные

$$\langle \hat{u}|\hat{B}|\hat{v}\rangle = \langle u|B|v\rangle^{*}; \tag{24}$$

(iii) любая постоянная c, рассматриваемая как оператор, преобразуется в комплексно сопряженную величину

$$KcK^{\dagger} = c^{*}; \tag{25}$$

(iv) любое соотношение между векторами и (или) операторами справедливо также и для преобразованных величин при замене всех коэффициентов на комплексно сопряженные. Другими словами, преобразование K сохраняет все равенства между векторами и (или) операторами, если условиться рассматривать все постоянные, фигурирующие в равенстве, как операторы. Например, перестановочные соотношения

$$[q, p] = i\hbar, \quad [J_x, J_y] = i\hbar J_z \tag{26а}$$

переходят соответственно в

$$[\hat{q}, \hat{p}] = -i\hbar, \quad [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = -i\hbar \hat{J}_z. \tag{26б}$$

§ 5. Антилинейные операторы и представления

Оператор K_Q комплексного сопряжения, связанный с представлением $\{Q\}$. По определению, K_Q является оператором, переводящим волновые функции представления $\{Q\}$ в комплексно сопряженные функции. *Действие оператора K_Q зависит от рассматриваемого представления и в особенности от выбора фаз базисных векторов.*

Пусть $|1\rangle$, $|2\rangle$, ..., $|n\rangle$, ... — базисные векторы представления $\{Q\}$. Тогда K_Q — антилинейный оператор, оставляющий эти векторы инвариантными,

$$K_Q|n\rangle = |n\rangle. \tag{27}$$

Следовательно, K_Q полностью определен. Очевидно, что выполнены соотношения

$$K_Q^+ = K_Q, \quad K_Q^2 = 1, \tag{28}$$

так что K_Q — антиунитарен. Ясно, что для K выполняется упомянутое выше свойство, а именно: *при антиунитарном преобразовании K_Q матрицы представления $\{Q\}$ переходят в комплексно-сопряженные*, таким образом, мы имеем

$$\langle n|(K_Q|u\rangle) = \langle n|u\rangle^*, \quad (\langle v|K_Q)|n\rangle = \langle v|n\rangle^*,$$
$$\langle m|(K_QBK_Q)|n\rangle = \langle m|B|n\rangle^* \ (B \text{ — линейный оператор}).$$

Таким образом, в представлении $\{Q\}$ действие оператора K_Q состоит исключительно в переходе к комплексно сопряженным величинам. Действие любого другого антилинейного оператора A можно легко определить, заметив, что A является произведением K_Q и линейного оператора, т. е. A всегда можно представить в виде

$$A = (AK_Q)K_Q = K_Q(K_QA), \tag{29}$$

где (AK_Q) и (K_QA) — линейные операторы, переходящие друг в друга при преобразовании K_Q

$$K_QA = K_Q(AK_Q)K_Q$$

(если A антиунитарен, то (K_QA) и (AK_Q) унитарны).

Изменение представления. Рассмотрим другое представление $\{\Xi\}$. Обозначим K_Ξ оператор комплексного сопряжения, связанный с этим представлением, в остальном будем следовать обозначениям § VII. 21. В частности, матрицей преобразования векторов и *линейных* операторов служит унитарная матрица $S(\xi; n) \equiv \langle\xi|n\rangle$.

Если эта матрица вещественна, то векторы нового базиса инвариантны относительно действия оператора K_Q, иными словами,

$$\text{если } S = S^*, \text{ то } K_\Xi = K_Q.$$

В этом случае линейные операторы AK_{Ξ} и $K_{\Xi}A$, соответствующие в представлении $\{\Xi\}$ заданному антилинейному оператору, те же, что и операторы, соответствующие A в представлении $\{Q\}$.

Если это не так, то оператор AK отличен от AK_Q. Полезно найти способ построения матрицы $(AK_{\Xi})_{\Xi}$, описывающей оператор AK_{Ξ} в представлении $\{\Xi\}$ по матрице $(AK_Q)_Q$, оператора AK_Q в представлении $\{Q\}$. Имеем

$$\begin{aligned}\langle\xi|(AK_{\Xi})|\xi'\rangle &= \langle\xi|(AK_Q)(K_QK_{\Xi})|\xi'\rangle = \\ &= \sum_{mn}\langle\xi|m\rangle\langle m|(AK_Q)|n\rangle\langle n|(K_QK_{\Xi})|\xi'\rangle = \\ &= \sum_{mn}\langle\xi|m\rangle\langle m|(AK_Q)|n\rangle\langle n|\xi'\rangle^*,\end{aligned}$$

т. е.

$$(AK_{\Xi})_{\Xi} = S(AK_Q)_Q\tilde{S}. \tag{30}$$

Аналогично

$$(K_{\Xi}A)_{\Xi} = (AK_{\Xi})^*_{\Xi} = S^*(K_QA)_QS^+. \tag{31}$$

Раздел II. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ГРУППЫ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ

§ 6. Преобразования динамических переменных и динамических состояний системы

Выше мы уже определили понятия «вращение физической системы» и «перестановка частиц физической системы».

В более общем случае, действие преобразования $\mathcal{T}$ на систему состоит в замене каждой из ее переменных на новую переменную, а каждого состояния — на новое состояние при сохранении физических характеристик системы.

Таким образом, преобразование $\mathcal{T}$ устанавливает взаимнооднозначное соответствие между динамическими переменными: заданная переменная B преобразуется в новую переменную

$$B' \equiv \mathcal{T}[B].$$

По предположению образ B' имеет тот же спектр, что и B, а собственные состояния для каждого собственного значения переменной B' являются образами собственных состояний, соответствующих тому же собственному значению переменной B. Эти два условия выражают требование сохранения физических свойств при преобразовании динамических переменных. Такое условие можно сформулировать без ссылки на методы измерения, однако преобразование $\mathcal{T}$ особенно легко описать как преобразование, применяемое к измерительной аппаратуре, предназначенной для определения B: образ этой аппаратуры есть

аппаратура, предназначенная для измерения переменной B'. Таким образом, определяются смещения динамических переменных (вращения, сдвиги), отражения динамических переменных (отражение в точке, в плоскости) и т. д.

От преобразования переменных легко перейти к преобразованию состояний. Пусть $|u\rangle$ — вектор, описывающий возможное динамическое состояние системы. Этот вектор можно рассматривать как общий собственный вектор полного набора коммутирующих наблюдаемых и считать, что он определен с точностью до фазы. Образ вектора $|u\rangle$ при преобразовании $\mathcal{T}$

$$|u'\rangle \equiv \mathcal{T}[|u\rangle]$$

является общим собственным вектором преобразованных наблюдаемых. Таким образом, $\mathcal{T}$ устанавливает взаимно-однозначное соответствие между векторами состояния, определенными с точностью до фазы.

По определению, преобразование сохраняет физические свойства динамических состояний: для системы, находящейся в состоянии $|u'\rangle$, вероятность того, что при измерении будет получен результат, соответствующий состоянию $|v'\rangle$, т. е. образу состояния $|v\rangle$, равна вероятности того, что для системы, находящейся в состоянии $|u\rangle$, при том же измерении будет получен результат, соответствующий состоянию $|v\rangle$. Иными словами, $|\langle u'|v'\rangle|^2 = |\langle u|v\rangle|^2$ для всех $|u\rangle$ и $|v\rangle$. Таким образом, рассматриваемое взаимно-однозначное соответствие сохраняет модуль скалярного произведения. Согласно теореме III фазы преобразованных векторов всегда можно фиксировать так, чтобы преобразование стало унитарным или антиунитарным. Это позволяет записать

$$|u'\rangle = T|u\rangle, \tag{32}$$

где T — унитарный или антиунитарный оператор, соответствующий преобразованию. В обоих случаях имеем

$$TT^\dagger = T^\dagger T = 1. \tag{33}$$

Из закона (32) преобразования векторов легко получить закон преобразования оператора плотности

$$\rho' = T\rho T^\dagger. \tag{34}$$

Рассмотрим еще одно преобразование наблюдаемых. Поскольку физические свойства сохраняются при рассматриваемых преобразованиях, то сохраняются и средние значения. Таким образом, для наблюдаемой B для всех $|u\rangle$ имеем

$$\langle u'|B'|u'\rangle = \langle u|B|u\rangle$$

или [1])

$$\langle u \,|\, (T^{\dagger}B'T)\, u\rangle = \langle u \,|\, B \,|\, u\rangle.$$

Из теоремы I и соотношений (33) имеем

$$B' = TBT^{\dagger}, \quad B = T^{\dagger}B'T. \tag{35}$$

Из равенств (35) следует важное свойство неизменности алгебраических соотношений между наблюдаемыми системы в случае, когда преобразование описывается линейным оператором T. Если же T антилинеен, то эти соотношения заменяются на комплексно сопряженные соотношения.

Это приводит к весьма ограничительным условиям на законы преобразования наблюдаемых. Всякая наблюдаемая B является некоторой *вещественной* функцией $F(\xi)$ фундаментальных наблюдаемых $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n, \ldots$ системы. Образ этой наблюдаемой есть $B' \equiv F(\xi')$ Итак, *преобразование $\mathcal{T}$ полностью определяется, если известны законы преобразования основных наблюдаемых*, т. е. если известны функции $f_1(\xi), \ldots, f_n(\xi), \ldots$, такие, что

$$\mathcal{T}[\xi_n] \equiv \xi_n' = f_n(\xi).$$

Последнее определяет также перестановочные соотношения для наблюдаемых ξ'. Так как преобразования обязаны сохранять алгебраические соотношения, то имеется всего две возможности: *либо преобразование сохраняет фундаментальные перестановочные соотношения, либо меняет их знак* [2]). В первом случае оператор T, соответствующий преобразованию, линеен, во втором — антилинеен (см. ур. (26а — 26б)).

Оператор T должен удовлетворять равенствам

$$\xi_n' = T\xi_n T^{\dagger}, \tag{36}$$

содержащим все физические свойства T. Однако этих равенств недостаточно для полного определения T. Пусть T_1 — другой

---

[1]) В случае, когда оператор T линеен, эти соотношения очевидны, они справедливы также и при антилинейном T, так как $\langle u|B|u\rangle$ вещественны.

[2]) Преобразованиями классической механики являются преобразования, сохраняющие скобки Пуассона

$$\{A_{\mathrm{cl}}, B_{\mathrm{cl}}\}$$

каждой пары $(A_{\mathrm{cl}}, B_{\mathrm{cl}})$ динамических переменных системы (канонические преобразования). Аналогично преобразованиями, сохраняющими физические свойства в квантовой механике, будут те преобразования, которые сохраняют соответствующие выражения

$$\frac{1}{i\hbar}[A, B].$$

унитарный (или антиунитарный) оператор, удовлетворяющий тем же соотношениям. Тогда имеем (опуская индекс n для упрощения записи)

$$T_1^\dagger \xi' T_1 = \xi$$

и, следовательно,

$$T_1^\dagger T \xi T^\dagger T_1 = \xi$$

или

$$[T_1^\dagger T, \xi] = 0 \text{ для всех } \xi. \tag{37}$$

Если предполагать *неприводимость* пространства состояний $\mathscr{E}$ по отношению к наблюдаемым ξ, т. е. что в $\mathscr{E}$ не содержится подпространств, инвариантных относительно ξ, то равенства (37) удовлетворяются тогда и только тогда, когда оператор $T_1^\dagger T$ пропорционален единичному.

Этот результат следует из леммы Шура (§ Г. 8). Ему можно дать прямое доказательство следующим образом. Пусть $|u\rangle$ — общий собственный вектор *полного* набора коммутирующих наблюдаемых. Поскольку $C \equiv T_1^\dagger T$ коммутирует с каждой из этих наблюдаемых, то $|u\rangle$ является собственным вектором C: $C|u\rangle = c|u\rangle$. Поскольку C коммутирует с каждой функцией $F(\xi)$ наблюдаемых системы, то имеем также и

$$CF(\xi)|u\rangle = cF(\xi)|u\rangle \text{ при всех } F(\xi).$$

Пространство, образованное векторами $F(\xi)|u\rangle$, является подпространством в $\mathscr{E}$, инвариантным относительно ξ, а так как $\mathscr{E}$, по предположению, неприводимо, то этим подпространством может быть лишь само $\mathscr{E}$. Следовательно $C = c$.

Если предполагать, как мы и делали до сих пор, что каждый вектор пространства состояний можно рассматривать как собственный вектор некоторого полного набора коммутирующих наблюдаемых, то свойство неприводимости выполняется автоматически (задача 1). Ясно, что приведенное выше обсуждение имеет смысл только в том случае, когда используемые наблюдаемые являются физическими наблюдаемыми. Мы всегда будем предполагать, что пространство $\mathscr{E}$ неприводимо по отношению к физическим наблюдаемым [1]). В этом предположении постоянная c равна единице по модулю, поскольку T и T_1 унитарны. Итак, имеем

$$T_1 = e^{i\alpha} T.$$

Вывод: *с каждым преобразованием $\mathscr{T}$ связан унитарный или антиунитарный оператор T, определенный с точностью до фазы законами преобразования фундаментальных переменных си-*

[1]) См. ссылку в § XIII. 14 на работу, в которой неприводимость не предполагается.

стемы (ур. (36)). *Оператор T унитарен, если преобразование сохраняет перестановочные соотношения, и антиунитарен, если преобразование изменяет знак перестановочных соотношений.*

Фаза оператора T может быть выбрана произвольно и не влияет ни на физические свойства преобразования, ни на законы преобразования наблюдаемых и операторов плотности, ни на различные алгебраические операции над операторами.

§ 7. Группы преобразований

Из различных имеющихся в нашем распоряжении преобразований мы можем образовать некоторое число *групп* преобразований, где термин группа используется в его математическом понимании (ср. § Г. 2).

Произведение $\mathcal{T}_{21} \equiv \mathcal{T}_2\mathcal{T}_1$ преобразований $\mathcal{T}_1$ и $\mathcal{T}_2$ является преобразованием, которое состоит в применении $\mathcal{T}_2$ к результату действия $\mathcal{T}_1$. Преобразующий оператор T_{21} с точностью до фазового множителя равен произведению T_2T_1. Это произведение *ассоциативно*, но не обязательно должно быть коммутативным.

Тождественное преобразование $\mathcal{I}$ — преобразование, при котором каждая наблюдаемая переходит в себя. Соответствующий этому преобразованию оператор является оператором умножения на произвольный фазовый множитель.

Обратное преобразование $\mathcal{T}^{-1}$ определяется соотношением $\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T} = \mathcal{T}\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{I}$. Поскольку $\mathcal{T}$ определяет взаимно однозначное соответствие, то обратное преобразование всегда существует.

Итак, каждое из преобразований, описанных в § 6, можно рассматривать как элемент некоторой группы $\mathcal{G}$.

Среди всевозможных групп *группа пространственных преобразований* (трансляций, вращений и отражений) *и ее разнообразные подгруппы* являются группами, физическое значение которых очевидно. Среди подгрупп этой группы следует упомянуть группу трансляций, группу вращений (вокруг точки), группу смещений (трансляций и вращений), группы отражений относительно точки и относительно плоскости, группу вращений и отражений (вращения вокруг точки и отражения относительно той же точки), группы симметрии кристаллов.

В предыдущей главе мы встретились с группами другого типа — *группами перестановок* подобных частиц. Мы также рассматривали перестановки, которые затрагивали только часть переменных, описывающих частицы. В частности, там была введена группа преобразований в зарядовом пространстве, с которой в случае системы нуклонов связана *группа изотопических вращений*, или группа вращений в зарядовом пространстве.

Преобразования, явно затрагивающие время, удобно рассмотреть отдельно. Среди них, в первую очередь, следует отметить преобразования Галилея, которые мы упоминаем здесь для полноты (задача 7). Они являются нерелятивистскими аналогами чисто лоренцевских преобразований. Последние вместе с пространственными вращениями образуют собственную группу Лоренца, которая будет обсуждена в пятой части. Имеется также группа временных сдвигов и, наконец, операция обращения времени. Временны́е трансляции и обращение времени будут изучаться в разделе IV. В оставшейся части настоящего раздела мы будем рассматривать только преобразования, не затрагивающие время явно.

§ 8. Группы операторов преобразований

Пусть $[\mathscr{T}]$ — множество преобразований $\mathscr{T}_1, \mathscr{T}_2, \ldots, \mathscr{T}_i, \ldots$. Каждому элементу $\mathscr{T}_i$ этого множества можно сопоставить оператор T_i, определяющий преобразование векторов и операторов в пространстве состояний. Оператор T задается своими физическими свойствами только с точностью до фазового множителя, который мы пока оставляем произвольным. Мы получим множество $[T]$ операторов преобразования, элементы которого находятся во взаимно однозначном соответствии с элементами из $[\mathscr{T}]$.

Предположим теперь, что $[\mathscr{T}]$ является некоторой группой $\mathscr{G}$. Отсюда еще не следует, что множество $[T]$ является группой. Действительно, при указанном соответствии между $[\mathscr{T}]$ и $[T]$ произведения сохраняются только с точностью до фазового множителя. Для каждого произведения

$$\mathscr{T}_k = \mathscr{T}_j \mathscr{T}_i$$

имеем

$$T_k = e^{i\alpha_{ji}^k} T_j T_i,$$

где α_{ij}^k — некоторая фаза, зависящая от выбора фазы у T_i, T_j и T_k. Для того чтобы $[T]$ было группой, надо чтобы все α_{ji} обращались в нуль. Тогда группа $[T]$ изоморфна группе $\mathscr{G}$.

Если фазы операторов T_i могут быть выбраны так, чтобы $[T]$ было группой, то такой выбор, очевидно, является наиболее удобным. Такая возможность имеется для ряда групп, но не для всех. В частности, это возможно для группы перестановок (гл. XIV), но невозможно для группы вращений (§ XIII. 5), если система содержит нечетное число частиц с полуцелым спином. В последнем случае операторы вращений $R(\alpha\beta\gamma)$, определяемые соотношением (XIII. 60), образуют группу, однако каждому вращению $\mathscr{R}$ соответствуют два оператора R, отличающиеся друг от друга знаком. Если мы выберем один из них в качестве

элемента множества $[R]$, то мы установим взаимно однозначное соответствие между вращениями и операторами вращений, однако произведение сохранится лишь с точностью до знака и множество $[R]$ не будет группой.

Для получения множества операторов преобразования может оказаться необходимым сопоставлять каждому преобразованию $\mathscr{T}_i$ не один оператор T_i, а набор (T_i) операторов, отличающихся друг от друга фазовым множителем. Если набор (T_i) выбран подходящим образом, то полученное множество $\{T\}$ операторов преобразования образует группу G, гомоморфную группе $\mathscr{G}$. Пусть (1) — множество операторов, каждый из которых соответствует тождественному преобразованию $\mathscr{I}$. Элементами множества (1) являются единичный оператор 1 и, возможно, другие операторы, получаемые из 1 умножением на фазовый множитель. Множество (1) является инвариантной подгруппой в группе G, а фактор-группа $G/(1)$ изоморфна $\mathscr{G}$ (ср. § Г. 5).

Таким образом, можно построить много множеств $\{T\}$, имеющих структуру группы [1]). Практически мы выбираем одно из них. Очевидно, что следует выбирать множество $\{T\}$ по возможности более простым. В результате мы получим группу операторов G, гомоморфную группе $\mathscr{G}$.

Во всех случаях, встретившихся к настоящему времени в квантовой теории, всегда удается выбрать G так, чтобы каждому элементу группы $\mathscr{G}$ соответствовал *либо один оператор из* G (изоморфизм), *либо, если это не так, два оператора из* G, *различающихся знаком*. Первый вариант всегда осуществляется в случае системы, содержащей четное число полуцелых спинов. Выше мы уже имели пример реализации второго варианта при рассмотрении вращений полуцелых спинов. Мы встретимся со вторым вариантом также при рассмотрении обращения времени. Более того, второй вариант всегда реализуется, когда система имеет нечетное число частиц с полуцелым спином.

§ 9. Непрерывные группы и инфинитезимальные преобразования. Трансляции. Вращения

В качестве иллюстрации общей теории построим группы операторов G для некоторых групп $\mathscr{G}$. Сперва рассмотрим непрерывные группы, которые имеют бесконечное число элемен-

[1]) Наиболее сложное из этих множеств получается при сопоставлении каждому преобразованию $\mathscr{T}_i$ всех операторов, удовлетворяющих (36): в этом случае все элементы из (T_i) получаются домножением одного из них на фазовый множитель. Практически всегда можно наложить на T_i условие вещественности, фиксирующее фазовый множитель с точностью до знака без нарушения группового свойства. Множество (T_i) тогда состоит точно из двух элементов, отличающихся друг от друга знаком (см. сноску к § XV. 17).

тов, зависящих от одного или нескольких непрерывно меняющихся параметров, точнее, те группы, у которых все конечные преобразования могут быть представлены рядами инфинитезимальных. Это справедливо для группы вращений и группы пространственных трансляций. В этом случае для получения преобразования наблюдаемых под действием любого элемента группы оказывается достаточным установить лишь преобразование наблюдаемых под действием инфинитезимальных операций. Каждому инфинитезимальному преобразованию группы можно сопоставить инфинитезимальный оператор преобразования, т. е. унитарный оператор, бесконечно мало отличающийся от 1 [1]).

Предположим для простоты, что элемент группы зависит лишь от одного непрерывного параметра α и что последний выбран так, что

$$\mathscr{T}(\alpha) \xrightarrow[\alpha \to 0]{} \mathscr{I}.$$

В первом порядке по $\delta\alpha$ оператор, соответствующий $\mathscr{T}(\delta\alpha)$, имеет вид

$$T(\delta\alpha) = 1 - i\Theta\delta\alpha,$$

где Θ — эрмитов оператор (так как T унитарен).

Если наблюдаемая ξ преобразуется в $\xi + \delta\xi$ при преобразовании $\mathscr{T}(\delta\alpha)$, то мы имеем (ур. (VII. 96))

$$\delta\xi = -i\delta\alpha\,[\Theta, \xi],$$

т. е.

$$[\Theta, \xi] = i\frac{\delta\xi}{\delta\alpha}. \tag{38}$$

При заданном преобразовании $\mathscr{T}(\delta\alpha)$ величины $\delta\xi/\delta\alpha$ известны и соотношения (38) определяют Θ с точностью до постоянной [2]).

---

[1]) Этот оператор не может быть антиунитарным. Рассмотрим две некоммутирующие наблюдаемые. При инфинитезимальном преобразовании они изменятся только инфинитезимально, так что их коммутатор не может претерпеть конечного изменения и, в частности, не может изменить знак.

[2]) В классической механике вариация $\delta\alpha\,\partial\xi/\partial\alpha$ каждой наблюдаемой ξ при инфинитезимальном смещении $\mathscr{T}(\delta\alpha)$ определяется скобкой Пуассона

$$\frac{\partial\xi}{\partial\alpha} = \{\tau, \xi\},$$

где τ — сопряженный импульс, соответствующий α. Наблюдаемая $\hbar\Theta$ является квантовым аналогом τ. (При бесконечно малом вращении вокруг $\boldsymbol{u}$ τ — компонента момента импульса вдоль $\boldsymbol{u}$; при трансляции вдоль $\boldsymbol{u}$ τ является компонентой импульса вдоль $\boldsymbol{u}$.)

Рассмотрим, для примера, смещение частицы вдоль оси Ox. Пусть $\boldsymbol{r} \equiv (x, y, z)$ — координата, $\boldsymbol{p} \equiv (p_x, p_y, p_z)$ — импульс, а $\boldsymbol{s} \equiv (s_x, s_y, s_z)$ — спин частицы. При трансляции $\mathscr{T}_x(a)$ на расстояние a вдоль оси Ox девять основных переменных инвариантны, за исключением x, которая переходит в $x - a$ [1])

$$T(a)\, xT^{\dagger}(a) = x - a. \tag{39}$$

В частности, при инфинитезимальном преобразовании $\mathscr{T}_x(\delta a)$, $\delta x = -\delta a$, а все остальные вариации $\delta y, \ldots, \delta s_z$ обращаются в нуль. Соответствующий эрмитов оператор Θ_x удовлетворяет перестановочным соотношениям

$$[\Theta_x, x] = -i,$$
$$[\Theta_x, y] = \ldots = [\Theta_x, s_z] = 0,$$

что дает

$$\Theta_x = \frac{p_x}{\hbar} + k_0,$$

где k_0 — произвольная вещественная постоянная, которую мы положим равной нулю. Это изложение легко распространяется на случай трансляций N частиц и дает

$$\Theta_x = \frac{P_x}{\hbar}, \tag{40}$$

где $P_x = \sum_{i=1}^{N} p_x^{(i)}$ — *компонента вдоль оси Ox полного импульса системы N частиц.*

Инфинитезимальному сдвигу $\mathscr{T}_x(\delta a)$, таким образом, соответствует инфинитезимальный унитарный оператор

$$T_x(\delta a) = 1 - \frac{i}{\hbar} P_x \delta a.$$

Оператор конечного преобразования $T_x(a)$ можно выбрать в виде

$$T_x(a) = \exp(-iP_x a/\hbar),$$

---

[1]) Образ x' прообраза x действительно есть $x - a$, а не $x + a$. Пусть $|b\rangle$ — собственный вектор оператора x, соответствующий собственному значению b. Его образ $|b'\rangle$ является собственным вектором оператора x, соответствующим собственному значению $b + a$

$$x\,|\,b\rangle = b\,|\,b\rangle, \quad x\,|\,b'\rangle = (b + a)\,|\,b'\rangle.$$

Но из определения преобразования наблюдаемых имеем

$$x'\,|\,b'\rangle = b\,|\,b'\rangle,$$

откуда

$$x' = x - a.$$

Эту аргументацию полезно сравнить с доказательством из § XIII. 12.

что легко проверяется подстановкой этого выражения в соотношение (39).

Полученные таким образом операторы образуют группу, изоморфную группе сдвигов вдоль оси Ox. В частности, мы имеем

$$T_x(a)\,T_x(b) = T_x(b)\,T_x(a) = T_x(a+b).$$

Группа сдвигов вдоль оси Ox является подгруппой группы трансляций. Конкретный сдвиг $\mathcal{T}(\boldsymbol{a})$ определяется вектором $\boldsymbol{a}$, задающим смещение динамических состояний системы. Группа трансляций, таким образом, зависит от трех непрерывных параметров — компонент вектора $\boldsymbol{a}$. Закон композиции в этой группе имеет вид

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{a})\,\mathcal{T}(\boldsymbol{b}) = \mathcal{T}(\boldsymbol{b})\,\mathcal{T}(\boldsymbol{a}) = \mathcal{T}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}).$$

Обобщая полученные выше результаты на случай произвольных трансляций, сопоставим инфинитезимальному сдвигу $\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon})$ оператор

$$T(\boldsymbol{\varepsilon}) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{\varepsilon}), \tag{41}$$

где $\boldsymbol{P}$ — полный импульс системы N частиц. Из сказанного ранее следует, что оператор, связанный с трансляцией $\mathcal{T}(\boldsymbol{a})$, имеет вид

$$T(\boldsymbol{a}) = \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{P}\boldsymbol{a}/\hbar}. \tag{42}$$

Определенные таким образом операторы образуют группу, изоморфную группе трансляций, ибо

$$T(\boldsymbol{a})\,T(\boldsymbol{b}) = T(\boldsymbol{b})\,T(\boldsymbol{a}) = T(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}).$$

Группа вращений дает еще один пример непрерывной группы с тремя параметрами. Операторы вращений уже были найдены в главе XIII. Определяющую их формулу (XIII. 55) следует сравнить с формулой (41). Полный момент импульса $\boldsymbol{J}$ играет в группе вращений ту же роль, что и оператор полного импульса $\boldsymbol{P}$ в группе трансляций. Компонента $(\boldsymbol{u}\boldsymbol{J})$ полного момента импульса вдоль $\boldsymbol{u}$ определена с точностью до постоянной перестановочными соотношениями (XIII. 56) и (XIII. 57), которые соответственно описывают инфинитезимальные вращения скалярных и векторных наблюдаемых. Произвольная постоянная может быть фиксирована требованием, чтобы момент $\boldsymbol{J}$ был векторным оператором [1]).

Операторы вращений R определяются как произведения инфинитезимальных вращений. Это приводит к формуле (XIII. 60),

[1]) Это условие эквивалентно требованию, чтобы операторы $R_{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\varepsilon})$ были инфинитезимальными операторами группы.

которую следует сравнить с формулой (42). Указанные операторы образуют группу, изоморфную группе вращений, если система содержит четное число полуцелых спинов, и только гомоморфна ей, если система содержит нечетное число полуцелых спинов. Этот вопрос уже обсуждался нами, и мы не будем его рассматривать здесь снова.

Множество операторов T и R, которые определены формулами (42) и (60), и всевозможные произведения этих операторов также образуют группу. Если система содержит четное число полуцелых спинов, эта группа изоморфна группе смещений, если это не так, то рассматриваемая группа только гомоморфна группе смещений, и два оператора, отличающиеся знаком, соответствуют каждому из элементов последней.

§ 10. Конечные группы. Отражения

Среди всех групп простейшей, безусловно, является группа отражений в точке. Она содержит всего два элемента, тождественный элемент $\mathscr{I}$ и отражение $\mathscr{P}_0$: $\mathscr{P}_0^2 = \mathscr{I}$. При преобразовании $\mathscr{P}_0$ полярные векторы $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$ меняют знак, а аксиальные векторы $\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$ не меняются. Поскольку $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ одновременно изменяют знаки, это преобразование сохраняет перестановочные соотношения орбитальных переменных, а также перестановочные соотношения компонент спина. Следовательно, оператор S_0, определяющий отражение, линеен. Он является унитарным оператором, удовлетворяющим соотношениям

$$\begin{aligned} S_0 \boldsymbol{r} S_0^\dagger &= -\boldsymbol{r}, \\ S_0 \boldsymbol{p} S_0^\dagger &= -\boldsymbol{p}, \\ S_0 \boldsymbol{s} S_0^\dagger &= \boldsymbol{s}, \end{aligned} \tag{43}$$

которыми он определяется с точностью до фазы. Для того чтобы операторы S_0 и 1 образовывали группу, изоморфную группе отражений, мы должны потребовать выполнения равенства

$$S_0^2 = 1 \quad (S_0 = S_0^\dagger), \tag{44}$$

которое фиксирует фазу S_0 с точностью до знака.

Оператор S_0 полностью определяется своим действием на базисные векторы представления, например, представления $\{\boldsymbol{r}, s_z\}$. Мы примем следующее определение:

$$S_0 |\boldsymbol{r}\mu\rangle = |(-\boldsymbol{r})\,\mu\rangle, \tag{45}$$

которое согласовано с соотношениями (43) и (44) (задача 2). Тогда отражение волновой функции описывается соотношением

$$S_0 \psi(\boldsymbol{r}, \mu) = \psi(-\boldsymbol{r}, \mu).$$

Таким образом, оператор S_0 *совпадает* с оператором четности, введенным в § XIII. 23. Он является наблюдаемой с двумя собственными значениями, ± 1. Приведенное рассмотрение без труда можно распространить на случай систем, состоящих из нескольких частиц.

Отражение коммутирует со всеми вращениями $\mathscr{R}$. Произведения операций группы отражений и группы вращений образуют группу вращений и отражений. Отметим также, что S_0 коммутирует с любым оператором вращений, поскольку последние являются функциями полного момента импульса $\boldsymbol{J}$, а S_0 коммутирует с $\boldsymbol{J}$, ибо согласно (43)

$$S_0 \boldsymbol{J} S_0^+ = \boldsymbol{J}.$$

Итак, множество, образованное операторами S_0, R и их произведениями, также образует группу. В случае, когда группа $[R]$ изоморфна группе вращений (полный спин — целый), эта группа изоморфна группе вращений и отражений. Если это не так (полный спин полуцелый), то полученная группа только гомоморфна группе вращений и отражений, и каждому элементу последней сопоставляются два оператора, отличающиеся знаком. В частности, двумя операторами, соответствующими чистому отражению, являются $+S_0$ и $-S_0$, а тождественному отображению соответствуют операторы $+1$ и -1.

Рассмотрим теперь другой тип отражения — отражение в плоскости. Пусть $\mathscr{P}_{\boldsymbol{u}}$ — отражение в плоскости, перпендикулярной единичному вектору $\boldsymbol{u}$; $\mathscr{P}_{\boldsymbol{u}}$ является преобразованием группы вращений и отражений, а именно, произведением $\mathscr{P}_0$ и вращения на угол π вокруг $\boldsymbol{u}$ (или $-\boldsymbol{u}$)

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{u}} = \mathscr{P}_0 \mathscr{R}_{\boldsymbol{u}}(\pi). \tag{46}$$

Заметим, что

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{u}}^2 = \mathscr{I}. \tag{47}$$

Следовательно, $\mathscr{P}_{\boldsymbol{u}}$ и $\mathscr{I}$ образуют группу, и ее изучение можно скопировать с приведенного исследования отражений в точке. Помимо этого, используя соотношения (46), свойства одной из этих групп можно получить из свойств другой.

Мы рассмотрим только случай одной частицы. Оператор $S_{\boldsymbol{u}}$ является линейным унитарным оператором, удовлетворяющим соотношениям

$$\begin{aligned} S_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{r} S_{\boldsymbol{u}}^+ &= \boldsymbol{r} - 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}), \\ S_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{p} S_{\boldsymbol{u}}^+ &= \boldsymbol{p} - 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\boldsymbol{p}), \\ S_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{s} S_{\boldsymbol{u}}^+ &= -\boldsymbol{s} + 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\boldsymbol{s}) \end{aligned} \tag{48}$$

и его можно представить в виде

$$S_u = S_0 R_u(\pi) = S_0 e^{-i\pi(Ju)}, \tag{49}$$

что дает

$$S_u^2 = S_0^2 e^{-2\pi i(Ju)} = (-1)^{2J}. \tag{50}$$

При таком выборе фазы имеем

$$S_u^2 = -1$$

в случае полуцелого спина. Для получения образующего группу набора операторов преобразования отражению $\mathscr{P}_u$ следует сопоставить два оператора [1]) S_u и $-S_u$.

Еще одним примером конечной группы является группа перестановок n подобных частиц, которая изучалась в главе XIV. Каждой перестановке был сопоставлен линейный унитарный оператор перестановки. Множество операторов, полученное таким образом, образует группу, изоморфную группе перестановок [2]). Мы не будем возвращаться к этим вопросам здесь. Добавим лишь одно важное замечание. Перестановки коммутируют с пространственными преобразованиями, и из самого способа определения операторов перестановок следует, что они обладают тем же самым свойством по отношению к операторам пространственных преобразований.

Раздел III. ИНВАРИАНТНОСТЬ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

§ 11. Инвариантные наблюдаемые

Мы рассмотрим теперь вопрос об инвариантности сам по себе. Пусть $\mathscr{G}$ — некоторая группа преобразований. Обозначим G соответствующую группу операторов и пусть T_i — фиксированный элемент из G. Будем предполагать, что все T_i линейны (и унитарны). Обращение времени — единственное преобразование, приводящее к рассмотрению антиунитарных операторов, будет исследовано в разделе IV.

---

[1]) Если мы будем рассматривать только группу $\{S_u, \mathscr{I}\}$, то предпочтительнее определить $S_u = i^{2J} S_0 R_u(\pi)$, что дает $S_u^2 = 1$. При новом выборе фазы закон умножения (46) сохраняется только с точностью до фазы.

[2]) Тот же результат может быть получен при замене всех операторов, соответствующих нечетным перестановкам, на противоположные им. Все рассуждения, проведенные в главе XIV, могут быть повторены и при этом новом соглашении о фазе с одним исключением — усложнением формул за счет добавления знака (—) без каких-либо изменений полученных результатов.

Инвариантность наблюдаемой Q при преобразованиях группы выражается условием $T_i Q T_i^\dagger = Q$, т. е.

$$[Q, T_i] = 0 \text{ для всех } T_i. \tag{51}$$

Мы уже анализировали те следствия, которые можно извлечь из этих коммутационных соотношений в случае группы вращений (§ XIII. 17). Используя понятие группы и свойства линейных представлений группы G (см. Дополнение Г и, в частности, § Г. 9), эти следствия можно сформулировать весьма общим образом. Обозначим $|\tau j\mu\rangle$ базисные векторы стандартного представления группы G. Эти векторы нумеруются тремя квантовыми числами (или тремя наборами квантовых чисел). Индекс j обозначает неприводимое представление, которому принадлежит вектор $|\tau j\mu\rangle$. Индекс μ различает базисные векторы заданного неприводимого представления, а τ — дополнительное квантовое число, позволяющее, при необходимости, различать ортогональные эквивалентные неприводимые подпространства. Мы намеренно будем использовать те же обозначения, что и в § XIII. 6, очевидным обобщением материала которого является настоящее обсуждение. Важнейшим свойством Q является аналог соотношения (XIII. 120), а именно,

$$\langle \tau j\mu | Q | \tau' j'\mu' \rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'} Q^{(j)}_{\tau\tau'}. \tag{52}$$

Полное доказательство этого соотношения приведено в Дополнении Г (см. ур. (Г. 20)).

Во многих случаях это соотношение удается получить и без ссылки на общую теорию представлений групп. Для этого необходимо найти среди функций операторов T_i:

(i) множество J наблюдаемых, которые инвариантны относительно *всех* операций группы и собственные значения которых нумеруются квантовым числом j (или набором квантовых чисел);

(ii) множество M наблюдаемых, которые коммутируют друг с другом, но не со всеми элементами из группы, и собственные значения которых нумеруются квантовым числом μ.

Очевидно, что Q, J и M образуют множество коммутирующих наблюдаемых и, следовательно, оператору Q соответствует особенно простая матрица в каждом из представлений, где наблюдаемые J и M диагональны, а именно, матрица, определяемая соотношением (52).

Этот метод успешно применялся нами к группе вращений (см. ур. (XIII. 120)). В этом частном случае мы нашли одну наблюдаемую категории (i), а именно, $\boldsymbol{J}^2$, и одну наблюдаемую категории (ii), а именно, J_z. Этот метод также может быть применен к группе вращений и отражений с $\boldsymbol{J}^2$ и S_0, т. е. полным моментом импульса и четностью, как элементами множества J

из категории (i) и наблюдаемой J_z в качестве множества M из категории (ii). Отметим, что имеется определенный произвол в выборе M. В случае группы вращений обычно используют J_z, однако с тем же успехом можно использовать J_x или J_y, а также любую другую компоненту векторного оператора $\boldsymbol{J}$.

Собственные состояния наблюдаемой Q получаются диагонализацией по отдельности матриц $Q^{(j)}_{\tau\tau'}$, каждая из которых соответствует вполне определенному собственному значению оператора J. Итак, каждому значению j соответствует набор $q^{(j)}_s$ собственных значений наблюдаемой Q, которые при необходимости нумеруются квантовым числом (или числами) s. Пусть d_j есть число возможных значений μ ($2j+1$ в случае вращений). Каждому из этих значений соответствует одна и та же матрица $Q^{(j)}_{\tau\tau'}$. Таким образом, каждое невырожденное собственное значение этой матрицы является d_j-кратно вырожденным собственным значением наблюдаемой Q, а каждое p-кратно вырожденное собственное значение этой матрицы является pd_j-кратно вырожденным собственным значением Q. Если $d_j \neq 1$, то все собственные значения наблюдаемой Q, соответствующие квантовому числу j, вырождены и степень их вырождения кратна d_j. Это вырождение является непосредственным следствием инвариантности Q относительно группы G и называется *G-вырождением*.

§ 12. Свойства инвариантности гамильтониана и законы сохранения

Пусть гамильтониан H инвариантен относительно преобразований группы $\mathcal{G}$. Тогда мы можем повторить для гамильтониана все то, что было сказано относительно инвариантных наблюдаемых. Исходя из коммутационных соотношений

$$[H, T_i] = 0 \text{ для любого оператора } T_i \text{ из } G, \qquad (53)$$

образуем наблюдаемые типа J и M. Эти операторы вместе с H образуют множество наблюдаемых, которые можно диагонализовать одновременно. Более того, спектр оператора H имеет *G-вырождение*.

Как и в классической механике, инвариантность гамильтониана приводит к законам сохранения. Действительно, поскольку всякая наблюдаемая (не зависящая явно от времени), которая перестановочна с H, является интегралом движения, то мы имеем очевидное свойство.

Если H инвариантен относительно преобразований группы, то всякая наблюдаемая, являющаяся функцией операторов группы, представляет собой интеграл движения.

В частности, этим свойством обладают определенные выше наблюдаемые (J, M) и поскольку они коммутируют друг с дру-

гом, то их значения можно измерить одновременно и они остаются фиксированными с течением времени.

Итак, с каждой группой связано некоторое число законов сохранения. Всякий раз, когда сохраняющаяся наблюдаемая имеет классический аналог, эти законы сохранения идентичны соответствующим классическим законам [1]). Ниже указаны наиболее часто встречающиеся из них.

(i) *Трансляционная инвариантность и сохранение полного импульса.* Необходимое и достаточное условие инвариантности гамильтониана относительно трансляций состоит в инвариантности его относительно инфинитезимальных трансляций, т. е. (ур. (41))

$$[H, \boldsymbol{P}] = 0, \tag{54}$$

где $\boldsymbol{P}$ — полный импульс системы. Таким образом, три компоненты полного импульса являются интегралами движения и полный импульс сохраняется. Кроме того, поскольку P_x, P_y и P_z коммутируют друг с другом, то их можно одновременно точно определить и они сохраняют свои значения с течением времени.

(ii) *Инвариантность относительно вращений и сохранение момента импульса.* Эти вопросы уже изучались в главе XIII. Напомним, что инвариантность гамильтониана относительно вращений выражается условием: $[H, \boldsymbol{J}] = 0$.

(iii) *Инвариантность относительно отражений и сохранение четности.* Из инвариантности гамильтониана относительно отражений в точке

$$[H, S_0] = 0, \tag{55}$$

следует, что четность S_0 является интегралом движения.

(iv) *Инвариантность относительно перестановок и сохранение симметрии.* В системе, состоящей из тождественных частиц, гамильтониан H инвариантности относительно любой перестановки P этих частиц

$$[H, P] = 0 \text{ при всех } P.$$

Отсюда следует, что любая наблюдаемая, построенная из P, является интегралом движения. Таковыми являются проекторы S и A на симметричные и антисимметричные состояния соответственно

$$[H, S] = 0, \quad [H, A] = 0.$$

Таким образом, S и A являются интегралами движения. Мы видели в главе XIV, что эти свойства операторов S и A являются

[1]) Это имеет место в случае, когда наблюдаемые связаны с инфинитезимальными смещениями (см. 1-ю сноску к § XV. 9).

необходимыми для внутренней согласованности постулата о симметризации.

(v) *Зарядовая независимость и сохранение изотопического спина.* Пусть $\boldsymbol{T}$ — полный изотопический спин системы нуклонов. Если нуклон-нуклонные силы зарядово независимы, то гамильтониан системы инвариантен относительно вращений в пространстве изотопического спина, т. е.

$$[H, \boldsymbol{T}] = 0. \tag{56}$$

Следовательно, компоненты наблюдаемой $\boldsymbol{T}$, а также наблюдаемые, являющиеся функциями этих трех компонент, являются интегралами движения. В частности $\boldsymbol{T}^2$ и T_z — интегралы движения. (*N. B.* Сохранение T_z есть не что иное как сохранение заряда.)

§ 13. Свойства инвариантности и эволюция динамических состояний

Покажем теперь, что из инвариантности H относительно группы $\mathcal{G}$ следует инвариантность оператора эволюции $U(t, t_0)$ относительно той же группы. Этот оператор, по определению, является решением интегрального уравнения

$$U(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} HU(t', t_0)\, dt'.$$

Домножив обе части этого равенства слева на T_i и справа на $T_i^\dagger$, учитывая унитарность оператора T_i и свойство (53), имеем

$$T_i U(t, t_0) T_i^\dagger = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} HT_i U(t', t_0) T_i^\dagger\, dt'.$$

Поскольку U и $T_i U T_i^\dagger$ удовлетворяют одному и тому же интегральному уравнению, то они совпадают. Таким образом,

$$[U(t, t_0), T_i] = 0 \text{ для всех } T_i \text{ из } G. \tag{57}$$

Одним из следствий инвариантности U относительно преобразований группы являются законы сохранения, приведенные в предыдущем параграфе. Более того, если $|\psi(t)\rangle$ — решение уравнений движения, то так как U и T_i коммутируют, преобразованный вектор $T_i|\psi(t)\rangle$ также является решением. Динамические состояния, описываемые этими векторами, в каждый момент времени связаны преобразованием $\mathcal{T}_i$. Следовательно, закон движения динамических состояний инвариантен относительно преобразований группы $\mathcal{G}$.

Два динамических состояния, являющиеся образами друг друга относительно некоторого преобразования $\mathcal{T}_i$ группы $\mathcal{G}$, сохраняют это свойство с течением времени.

Это свойство инвариантности можно эквивалентным образом сформулировать посредством операций измерения.

Предположим, что после того как в момент времени t_0 система приготовлена тем или иным способом, над системой в более поздний момент времени t осуществляется некоторая процедура измерения. Результат такого измерения не изменится, если осуществить преобразование $\mathcal{T}_i$ группы как над начальным состоянием (т. е. над аппаратурой, используемой для приготовления системы), *так и над величиной* (*или величинами*), *подлежащими измерению* (т. е. над аппаратурой, используемой для их наблюдения) при прочих равных условиях.

Предположим для примера, что система приготовлена в чистом состоянии, которое описывается вектором $|\varphi\rangle$ и измеряется вероятность обнаружения системы в чистом состоянии, определяемом вектором $|\chi\rangle$. Образы этих состояний при преобразовании описываются соответственно векторами $T_i|\varphi\rangle$ и $T_i|\chi\rangle$. Из коммутационных соотношений (57) получаем равенство вероятностей

$$|\langle\chi|\, T_i^\dagger U(t, t_0)\, T_i\,|\varphi\rangle|^2 = |\langle\chi|\, U(t, t_0)\,|\psi\rangle|^2. \tag{58}$$

В более общей ситуации, пусть ρ_0 — оператор плотности, описывающий состояние системы в момент времени ее приготовления t_0, а ρ описывает систему в момент времени ее измерения t. Типичное измерение состоит в определении вероятности того, что значения измеряемой величины (величин) будут находиться в некоторой области D. Если P_D — проектор на подпространство собственных состояний, соответствующих этой области, то указанная вероятность определяется равенством

$$w = \mathrm{Tr}\rho P_D = \mathrm{Tr} U(t, t_0)\,\rho_0\, U^+(t, t_0)\, P_D. \tag{59}$$

Предположим теперь, что мы исходим из начального состояния $\rho_0' \equiv T_i\rho_0 T_i^\dagger$ и что измерение осуществляется над преобразованной величиной (величинами), рассматриваемой в первом эксперименте. Собственным состояниям из области D соответствует проектор $P_D' \equiv T_i P_D T_i^\dagger$. Результатом нового измерения будет

$$w' = \mathrm{Tr}\, U(T_i\rho_0 T_i^\dagger)\, U^+(T_i P_D T_i^\dagger). \tag{60}$$

Принимая во внимание свойства следа, унитарность операторов T_i и соотношение (57), имеем

$$w' = w. \tag{61}$$

Действительно, если (58) справедливо при всех $|\varphi\rangle$ и $|\chi\rangle$, то имеем (61).

Выше мы, предполагая только инвариантность H относительно преобразований заданной группы $\mathcal{G}$, получили помимо прочего инвариантность «закона движения» динамических состояний по отношению к группе $\mathcal{G}$. Обратно, *можно постулировать инвариантность закона движения относительно группы $\mathcal{G}$ и исследовать следствия этого постулата.* Последний эквивалентен предположению о том, что для всякого преобразования $\mathcal{T}_i$ из группы, уравнение (58) выполняется при любых $|\varphi\rangle$ и $|\chi\rangle$, или (теорема II), что U и $T_i^\dagger U T_i$ совпадают с точностью до фазы:

$$T_i^\dagger U(t, t_0) T_i = e^{i\alpha_i} U(t, t_0). \tag{62}$$

На выбор фазовых множителей наложен ряд ограничений. Для большинства групп, встречающихся в физических исследованиях, эти фазовые множители равны 1 [1]).

Мы будем всегда предполагать, что это фазовое условие выполнено, даже когда оно и не следует из соображений внутренней согласованности. Постулат инвариантности тогда может быть записан в виде

$$[T_i, U(t, t_0)] = 0.$$

В случае инфинитезимального оператора U, $U(t + dt, t) = 1 - (i/\hbar) H\, dt$, из этого соотношения следует свойство симметрии гамильтониана

$$[T_i, H] = 0.$$

Итак, всякий постулат об инвариантности уравнения движения приводит к симметрии гамильтониана. В случае изолированной квантовой системы (нет внешнего поля) обычно постулируют инвариантность относительно группы смещений. Это означает, что пространство предполагается однородным (трансля-

---

[1]) Это связано с тем обстоятельством, что множители $e^{i\alpha_i}$ образуют одномерное представление группы $\mathcal{G}$ и являются непрерывными функциями t, стремящимися к 1 при $t \to t_0$. Если $\mathcal{G}$ — конечная группа или, по крайней мере, если $\mathcal{T}_i$ — элемент конечной группы, то существует целое число p, такое, что $\mathcal{T}_i^p = \mathcal{I}$. Отсюда следует, что $e^{i\alpha_i}$ является одним из корней p-й степени из единицы. Упомянутое выше условие требует, чтобы $e^{i\alpha_i} = 1$. Отражения в точке и отражения в плоскости дают примеры таких преобразований. Если единственным одномерным представлением группы $\mathcal{G}$ является тождественное, то мы, очевидно, имеем $e^{i\alpha_i} = 1$ для всех операций группы. Группа вращений и группа смещений являются группами такого типа. С другой стороны, если группа инвариантности уравнения движения ограничивается до группы трансляций, то из сказанного не следует с необходимостью обращение в нуль фаз α_i.

ционная инвариантность) и изотропным (инвариантность относительно вращений). До настоящего времени этот постулат никогда не вступал в конфликт с экспериментальными данными.

Долгое время считалось, что движение физических систем инвариантно относительно отражений. Это экспериментально подтверждается во всех явлениях, в которых участвуют только электромагнитные и так называемые ядерные взаимодействия, т. е. взаимодействия, ответственные за устойчивость атомных ядер. Однако эксперимент показывает, что этот постулат нарушается рядом взаимодействий, и в частности теми, которые отвечают за β-распад атомных ядер. Эти взаимодействия много слабее тех, которые были упомянуты выше. Всякий раз, когда этими взаимодействиями можно пренебречь, движение физических систем инвариантно относительно отражений и четность сохраняется. Такая ситуация имеет место в атомной физике, когда рассматриваются только электромагнитные взаимодействия.

При наличии внешнего поля свойства инвариантности уравнений движения зависят от симметрии внешнего поля. В качестве иллюстрации рассмотрим два примера, заимствованных из атомной физики, — эффект Штарка и эффект Зеемана.

§ 14. Симметрии эффектов Штарка и Зеемана

Эффект Штарка. Рассмотрим атомную систему во внешнем постоянном электрическом поле $\mathscr{E}$, направленном по оси z. Это поле инвариантно относительно трансляций, относительно вращений вокруг оси z и относительно отражений в плоскостях, параллельных оси z. Имеющаяся в этом случае группа инвариантности является произведением группы трансляций на группу отражений в плоскостях, содержащих ось Oz.

Будем предполагать, что движение центра масс уже отделено и рассмотрим только возможные состояния гамильтониана относительно переменных H, который инвариантен относительно отражений в плоскостях, содержащих Oz. Приводимые ниже рассмотрения базируются исключительно на этом свойстве инвариантности и не содержат ни детального описания, ни силы взаимодействия системы с электрическим полем.

Пусть $\mathscr{S}_u$ — отражение в произвольно выбранной плоскости, содержащей Oz, а S_u — соответствующий этому преобразованию оператор. Фазу S_u выберем так, чтобы выполнялось равенство $S_u^2 = 1$. Поскольку рассматриваемая группа порождается отражением $\mathscr{S}_u$ и инфинитезимальными вращениями вокруг оси Oz, то оператор преобразования является функцией от S_u и J_z. Итак, мы имеем два независимых интеграла движения,

S_u и J_z. Поскольку они не коммутируют

$$S_u J_z S_u = -J_z, \tag{63}$$

то некоторые из собственных значений H вырождены.

Заметим, далее, что J_z^2 коммутирует как с J_z, так и с S_u и, следовательно, со всеми операторами группы. Оператор J_z^2 является наблюдаемой типа J для данной группы (см. определение в § 11). В качестве наблюдаемой типа M можно выбрать либо J_z, либо S_u. В первом случае стационарные состояния будут классифицироваться по собственным значениям оператора J_z, во втором — в соответствии с набором (J_z^2, S_u).

Предположим, что система содержит четное число полуцелых спинов. Тогда возможными значениями J_z будут все целые числа. Обозначим одно из них m. Если $|\,\rangle$ — стационарное состояние, соответствующее этому значению, то $S_u|\,\rangle$ является стационарным состоянием с той же энергией, соответствующим собственному значению $-m$ оператора J_z. Если $m \neq 0$, то оба эти состояния ортогональны. Итак, если состояния классифицируются собственными значениями оператора J_z, то два противоположных собственных значения m, $-m$ порождают один и тот же спектр энергий, причем каждый уровень спектра имеет одну и ту же кратность вырождения. Иными словами, уровни энергии зависят только от $|m|$, и все уровни, соответствующие $|m| \neq 0$, имеют четную кратность вырождения.

Этот же результат можно получить и при классификации состояний по собственным значениям пары (J_z^2, S_u). Для обозначения этих собственных значений будем использовать символы m^+ и m^-, где m — неотрицательное целое число, квадрат которого равен собственному значению оператора J_z^2, а верхний индекс положителен или отрицателен соответственно тому, является ли $+1$ или -1 собственным значением оператора S_u. Для примера рассмотрим состояние m^+

$$J_z^2|\,m^+\rangle = m^2|\,m^+\rangle \qquad S_u|\,m^+\rangle = |\,m^+\rangle.$$

Если $m \neq 0$, то вектор $J_z|m^+\rangle$ не равен нулю и из (63) имеем

$$S_u(J_z|\,m^+\rangle) = -J_z S_u|m^+\rangle = -(J_z|\,m^+\rangle).$$

Итак, J_z, действуя на состояние m^+, дает состояние m^-. Если первое из состояний стационарно, то стационарно и второе, соответствующее тому же уровню энергии: энергетические уровни зависят только от положительного целого числа m и все имеют вырождение четного порядка. Случай $m = 0$ является исклю-

чением: спектры энергии в состояниях 0^+ и 0^- могут быть различны.

Эффект Зеемана. Рассмотрим теперь атомную систему в постоянном магнитном поле $\mathscr{H}$, направленном по оси z. При отражениях в плоскости, параллельной этой оси, $\mathscr{H}$ меняет знак. С другой стороны, $\mathscr{H}$ инвариантно относительно отражения $\mathscr{P}_0$ в начале координат. Группой инвариантности внешнего поля является группа, порождаемая трансляциями, вращениями вокруг оси Oz и отражениями $\mathscr{P}_0$. Как и в случае эффекта Штарка, будем рассматривать только симметрии гамильтониана H относительных переменных. Этот оператор H инвариантен относительно вращений вокруг оси Oz и отражений в начале координат. Пусть S_0 — оператор четности, фаза которого фиксирована таким образом, что $S_0^2 = 1$. Все преобразования группы описываются как функции наблюдаемых J_z и S_0, а эти две наблюдаемые коммутируют

$$S_0 J_z S_0 = J_z.$$

Следовательно, инвариантность H при преобразованиях группы не приводит к систематическому вырождению [1]).

Операторы H, S_0 и J_z можно одновременно диагонализовать, и каждый общий собственный вектор этих трех наблюдаемых является стационарным состоянием, инвариантным относительно преобразований группы. Этот результат основывается исключительно на свойствах симметрии H и не зависит ни от деталей, ни от силы взаимодействия системы с магнитным полем.

Раздел IV. ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ И ПРИНЦИП МИКРООБРАТИМОСТИ

§ 15. Сдвиги во времени и сохранение энергии

Среди всех преобразований, затрагивающих время, простейшими являются временные сдвиги. В классической механике инвариантность уравнений движения относительно временных сдвигов приводит к хорошо известному закону сохранения энергии (это требует независимости от времени функции Гамильтона). Мы получим аналогичное свойство в квантовой механике.

Пусть $|\psi(t)\rangle$ — возможное решение уравнений движения. Инвариантность уравнений движения системы относительно временного сдвига τ эквивалентна наличию другого решения $|\psi'(t)\rangle$, описывающего в момент времени t то динамическое со-

[1]) Иными словами, все неприводимые представления группы обязательно одномерны.

стояние, которое в момент времени $t+\tau$ описывалось исходным решением, т. е.

$$|\psi'(t)\rangle = e^{i\alpha(t,\tau)}|\psi(t+\tau)\rangle.$$

Для того чтобы каждое решение уравнений движения обладало таким свойством, необходимо, чтобы оператор U удовлетворял равенству

$$U(t, 0) = e^{i\alpha(t,\tau)} U(t+\tau, \tau), \tag{64}$$

где $\alpha(t, \tau)$ является фазой, которая может зависеть от t и τ. Для бесконечно малого t, положив $f(\tau) = \partial\alpha/\partial t|_{t=0}$, имеем

$$1 - \frac{i}{\hbar} H(0)\, dt = (1 + if(\tau)\, dt)\left(1 - \frac{i}{\hbar} H(\tau)\, dt\right),$$

т. е.

$$H(\tau) = H(0) + \hbar f(\tau). \tag{65}$$

Если закон движения инвариантен относительно произвольных временных сдвигов, то (64) должно выполняться для всех τ. Иными словами, гамильтониан постоянен с точностью до добавления (вещественной) функции времени. В действительности, эту функцию можно положить равной нулю без изменения каких-либо физических свойств системы. Замена гамильтониана $H(t)$ его значением в момент времени $t=0$ сказывается лишь в домножении $U(t, t_0)$ на фазовый множитель $\left[i\int_0^t f(t')\, dt'\right]$ (задача 6).

Итак, мы можем предполагать независимость гамильтониана от времени при инвариантности уравнений движения относительно временных сдвигов. Это предположение будет использоваться во всех приводимых ниже рассмотрениях. В этом случае уравнение (64) сводится к инвариантности $U(t, t_0)$ при временных сдвигах

$$U(t+\tau, \tau) = U(t, 0). \tag{66}$$

§ 16. Обращение времени в классической и квантовой механиках

В оставшейся части этого раздела мы будем рассматривать только консервативные системы. Законы движения таких систем часто оказываются инвариантными не только относительно временных сдвигов, но и относительно обращения времени. Эта инвариантность встречается также и в классической механике.

Лагранжева функция $L_{cl}(\dot{q}, q)$ классической механики является полиномом второго порядка по скоростям. Для многих

систем функция Лагранжа не содержит членов первого порядка, и мы имеем

$$L_{cl}(\dot{q}, q) = L_{cl}(-\dot{q}, q).$$

Системы, состоящие из изолированных частиц, всегда обладают этим свойством симметрии. Введение статического внешнего поля не всегда приводит к нарушению свойства симметрии. Оно сохраняется, например, в чисто электрическом поле. С другой стороны, в магнитном поле взаимодействие линейно по скоростям и, следовательно, нарушает это свойство. Если же указанное свойство симметрии имеется, то импульсы p являются линейными однородными функциями скоростей, а функция Гамильтона инварианта относительно обращения времени.

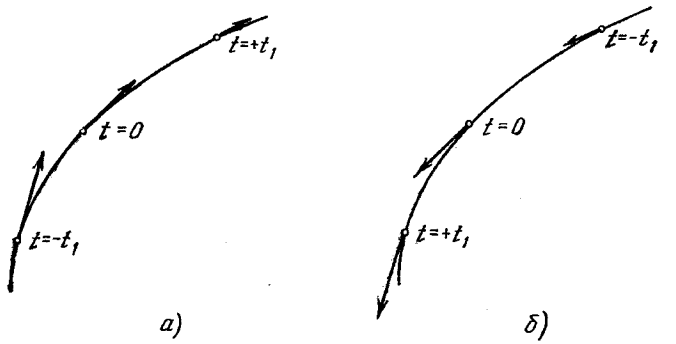


Рис. 7. Изображение двух классических траекторий ($а$) и ($б$), связанных отражением времени $r_а(t) = r_б(-t)$, $\dot{r}_а(t) = -\dot{r}_б(-t)$.

Для того чтобы обсуждение стало менее формальным, рассмотрим следствия такой симметрии на простом примере частицы в статическом потенциале. Тогда имеем

$$H(p, r) \equiv \frac{p^2}{2m} + V(r) = H(-p, r). \tag{67}$$

Отсюда следует, что все решения $r(t)$ уравнений движения обратимы во времени: функция $r_{\text{rev}}(t)$, которая определяется равенством

$$r_{\text{rev}}(t) = r(-t) \tag{68}$$

также является решением уравнений движения. Соответствие между двумя решениями представлено на рис. 7.

Положение частицы в момент времени t в одном из решений совпадает с положением частицы в момент времени $-t$ в другом; ее скорость в момент t в одном из решений противоположна

по направлению скорости в момент времени $-t$ в другом решении. Соответствие между импульсами то же, что и между скоростями

$$\boldsymbol{p}_{\text{rev}}(t) = -\boldsymbol{p}(-t). \tag{69}$$

Рассмотрим теперь аналогичную квантовую систему. Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{70}$$

Гамильтониан является вещественным оператором. Если изменить t на $-t$ и взять комплексное сопряжение от обеих частей уравнения, то получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r}, -t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right]\psi^*(\boldsymbol{r}, -t). \tag{71}$$

Иными словами, если $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ — решение уравнения Шредингера, то функция

$$\psi_{\text{rev}}(\boldsymbol{r}, t) \equiv \psi^*(\boldsymbol{r}, -t) \tag{72}$$

также является его решением.

Соответствие между ψ и ψ_{rev} на удивление аналогично соответствию между двумя классическими решениями, рассмотренному выше (уравнения (68)—(69)). Обозначив $P(\boldsymbol{r}, t)$ и $\Pi(\boldsymbol{p}, t)$ плотности вероятности для координаты и импульса в момент времени t, имеем

$$P_{\text{rev}}(\boldsymbol{r}, t) = P(\boldsymbol{r}, -t), \tag{68'}$$

$$\Pi_{\text{rev}}(\boldsymbol{p}, t) = \Pi(-\boldsymbol{p}, -t). \tag{69'}$$

§ 17. Обращение времени. Частица нулевого спина

Как видно из приведенного примера, обратимость во времени решений уравнения Шредингера связана с инвариантностью гамильтониана $H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})$ при замене $\boldsymbol{p}$ на $-\boldsymbol{p}$. Эта инвариантность означает, что $H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})$ описывается в волновой механике вещественным дифференциальным оператором. Мы приходим, таким образом, к определению преобразования динамических переменных и динамических состояний, которое будем называть *обращением времени* и при котором $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ переходят в $\boldsymbol{r}$ и $-\boldsymbol{p}$ соответственно. Обозначим K оператор, реализующий это преобразование, а само преобразование обозначим $\mathscr{K}$. По определению

$$K\boldsymbol{r}K^+ = \boldsymbol{r}, \quad K\boldsymbol{p}K^+ = -\boldsymbol{p}. \tag{73}$$

Это преобразование меняет знак коммутационных соотношений и, следовательно, K является *антиунитарным оператором*

(см. § 6). Соотношения (73) определяют этот оператор с точностью до фазового множителя. Обозначим K_0 оператор комплексного сопряжения в представлении волновой механики (антиунитарный оператор такого типа определен в § 5). Поскольку в рассматриваемом представлении матрицы, описывающие $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$, являются вещественной и чисто мнимой соответственно, то K_0, очевидно, удовлетворяет соотношениям (73). Следовательно, мы можем взять K_0 в качестве оператора обращения времени

$$K = K_0.$$

При таком выборе фазы действие K на волновую функцию сводится к комплексному сопряжению

$$K\Phi(\boldsymbol{r}) = \Phi^*(\boldsymbol{r}).$$

Предположение об инвариантности H относительно замены $-\boldsymbol{p}$ на $\boldsymbol{p}$ эквивалентно условию

$$[K, H] = 0. \tag{74}$$

Применив (антиунитарный) оператор K к обеим частям уравнения Шредингера, получаем

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K |\psi(t)\rangle = HK |\psi(t)\rangle,$$

т.е.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (K |\psi(-t)\rangle) = H(K |\psi(-t)\rangle).$$

Итак, если $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера, то ему удовлетворяет и вектор

$$|\psi(t)\rangle_{\text{rev}} \equiv K |\psi(-t)\rangle. \tag{75}$$

Динамическое состояние, описываемое вектором $|\psi\rangle_{\text{rev}}$ в момент времени t, является при обращении времени образом состояния, соответствующего вектору $|\psi\rangle$ в момент времени $-t$. Это и есть именно то свойство обратимости решений уравнения Шредингера, которое было обнаружено в предыдущем параграфе.

Из определяющих соотношений (73) следует, что преобразование $\mathscr{K}$ коммутирует со всеми пространственными преобразованиями (трансляциями, вращениями и отражениями). Отметим также, что K коммутирует с операторами пространственных преобразований, определенными в разделе II [1]). В частности,

---

[1]) Если преобразование $\mathscr{K}$ коммутирует с другим преобразованием $\mathscr{T}$, то мы имеем $KT = e^{i\alpha} TK$, где фазовый множитель $e^{i\alpha}$ зависит от выбора оператора T. Легко видеть, что этот оператор определен с точностью до знака, если выполнено равенство $KT = TK$.

Это позволяет получить определенные выводы о структуре группы операторов G, сопоставляемой группе преобразований $\mathscr{G}$ в случае, когда последние

K антикоммутирует с тремя компонентами импульса и, следовательно, коммутирует с инфинитезимальными операторами трансляций. Аналогично K антикоммутирует с тремя компонентами момента импульса

$$K(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})K^{+}=-(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) \tag{76}$$

и, следовательно, коммутирует с инфинитезимальными операторами вращений.

§ 18. Общее определение обращения времени

Для того чтобы расширить понятие обращения времени на самые общие системы частиц, мы должны определить обращение времени для спиновых переменных. Поскольку спин является частным случаем момента импульса, то он должен преобразовываться подобно моменту импульса (ур. (76)), т. е.

$$K\boldsymbol{s}K^{+}=-\boldsymbol{s}. \tag{77}$$

Операция обращения времени обращает спин. Это определение сохраняет свойства коммутации $\mathscr{H}$ с пространственными преобразованиями и, в частности, с вращениями. Более того, согласно (76) и (77) K антикоммутирует с компонентами полного момента импульса $\boldsymbol{J}$

$$K\boldsymbol{J}K^{+}=-\boldsymbol{J} \tag{78}$$

и, следовательно, коммутирует с операторами вращения (см. задачу 8), т. е. так как K антилинеен, (78) приводит к соотношению

$$K\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u})\varphi/\hbar}K^{+}=\exp\left[+\frac{i}{\hbar}\varphi\left(K(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u})K^{+}\right)\right]=\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u})\varphi/\hbar}.$$

Построим теперь оператор обращения времени для частицы спина s. Этот оператор определяется соотношениями (73) и (77). Обозначим K_0 оператор комплексного сопряжения, ассоциированный с представлением $\{\boldsymbol{r}, s_z\}$, в котором относительные фазы базисных векторов фиксированы обычным соглашением и, в частности, используются базисные векторы в спиновом пространстве, взятые в «стандартном» виде, определенном в гл. XIII. Таким образом, имеем

$$K_0\boldsymbol{r}K_0=\boldsymbol{r},\quad K_0\boldsymbol{p}K_0=-\boldsymbol{p}, \tag{79}$$

$$K_0s_xK_0=s_x,\quad K_0s_yK_0=-s_y,\quad K_0s_zK_0=s_z. \tag{80}$$

коммутируют с $\mathscr{H}$. Тогда мы можем взять за (T_i) (обозначения из § 8) пару преобразующих операторов, коммутирующих с K. В частности, (1) обозначает пару $(+1, -1)$. Множество $\{T\}$, образованное этими парами операторов (один из которых отличается от другого знаком), очевидно, образует группу и может быть взято в качестве группы G.

Положим

$$K = TK_0. \tag{81}$$

Поскольку $T = KK_0$ и $T^\dagger = K_0K^\dagger$, то (линейное) унитарное преобразование T действует по правилам

$$T\boldsymbol{r}T^\dagger = \boldsymbol{r}, \quad T\boldsymbol{p}T^\dagger = \boldsymbol{p}, \tag{82}$$

$$Ts_xT^\dagger = -s_x, \quad Ts_yT^\dagger = s_y, \quad Ts_zT^\dagger = -s_z. \tag{83}$$

Уравнения (82) и (83) порождают преобразование переменных $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$, *которое соответствует повороту спина на угол* π *вокруг оси* y. Пусть $Y^{(s)}$ — оператор, осуществляющий это вращение

$$Y^{(s)} = \mathrm{e}^{-i\pi s_y/\hbar}.$$

Величины T и $Y^{(s)}$ различаются только фазовым множителем. Поскольку фазовый множитель не имеет физического значения, то мы можем положить его равным 1, что дает

$$K = Y^{(s)}K_0 = \mathrm{e}^{-i\pi s_y/\hbar}K_0. \tag{84}$$

Для специального случая частицы спина 1/2

$$K = -i\sigma_yK_0. \tag{85}$$

Все сказанное выше без затруднений можно распространить на системы, состоящие из N частиц. Оператор K становится тензорным произведением операторов отражения времени отдельных частиц. Если K_0 — оператор комплексного сопряжения, ассоциированный со стандартным представлением $\{\boldsymbol{r}^{(1)}s_z^{(1)} \ldots \boldsymbol{r}^{(N)}s_z^{(N)}\}$, а $Y^{(S)}$ — оператор вращения спинов на угол π вокруг оси Oy, то при указанном выше выборе фазы получаем

$$K = Y^{(S)}K_0 = \mathrm{e}^{-i\pi S_y/\hbar}K_0. \tag{86}$$

§ 19. Обращение времени и комплексное сопряжение

Операция обращения времени $\mathscr{K}$ имеет много общего с комплексным сопряжением. Расширяя эту связь, будем называть *комплексно сопряженными* пару линейных операторов, являющихся образами друг друга при обращении времени. В частности, оператор Q называется:

(i) вещественным, если $KQK^\dagger = Q$;

(ii) чисто мнимым, если $KQK^\dagger = -Q$.

Всякая вещественная постоянная является вещественным оператором, а постоянная i — чисто мнимым оператором. Произведение i на вещественную постоянную дает чисто мнимый

оператор; сумма и произведение двух вещественных операторов являются вещественными операторами.

Не следует смешивать понятие вещественности с понятием эрмитовости. В этой связи уместно сделать следующие два замечания.

(а) В отличие от того, что имеется в случае эрмитова сопряжения, комплексно сопряженные операторы не обязаны описываться в заданном представлении комплексно сопряженными матрицами.

(б) Приведенное выше определение комплексного сопряжения не является единственно возможным. Всякое антиунитарное преобразование, квадрат которого равен $\mathscr{I}$, можно рассматривать как комплексное сопряжение.

При нашем определении комплексного сопряжения все наблюдаемые, которые являются функциями координат, вещественны, все импульсы и все спины чисто мнимы, а операторы пространственных преобразований, определенные так, как это делалось в разделе II, все вещественны (задача 8).

Понятие комплексного сопряжения можно распространить на случай векторов. Определим в качестве *вектора, комплексно сопряженного вектору* $|\rangle$, *вектор* $K|\rangle$. Повторное применение K может не давать исходный вектор кроме случая, когда $K^2 = 1$. Из равенства $\mathscr{K}^2 = \mathscr{I}$ не следует, что $K^2 = 1$, а лишь то, что K^2 коммутирует со всеми динамическими переменными, и, следовательно, является постоянной. Несложно показать (задача 9), что значение этой постоянной не зависит от выбора фазы, используемой в определении K, и что возможными значениями ее являются числа ± 1. Более того, это значение можно вычислить из выражения (86) для K. Поскольку K_0 коммутирует с $Y^{(S)}$ и $K_0^2 = 1$, то

$$K^2 = (Y^{(S)})^2 = e^{-i2\pi S_y/\hbar} \tag{87}$$

или, если обозначить n число частиц полуцелого спина в системе, то

$$K^2 = (-1)^n. \tag{88}$$

Если $K^2 = 1$ (n четно), то комплексно сопряженные векторы переходят друг в друга и можно определить вещественные векторы. Вектор $|r\rangle$ называют вещественным, если

$$K|r\rangle = |r\rangle.$$

По определению, *вещественным представлением* называют представление, все базисные векторы которого вещественны.

Для построения вещественного базиса можно поступать следующим образом. Выбирается произвольный вектор $|a\rangle$ и ли-

нейной комбинацией векторов $|a\rangle$ и $K|a\rangle$ образуют вещественный, нормированный на 1 вектор

$$|a^r\rangle = c\,|a\rangle + c^*(K|a\rangle).$$

Вещественность вектора $|a^r\rangle$ очевидна. Постоянная c выбирается так, чтобы норма вектора равнялась 1. Легко проверить, что такой выбор всегда возможен. Затем выбирают вектор $|b\rangle$, ортогональный к $|a^r\rangle$, и таким же образом конструируется вещественный вектор $|b^r\rangle$ нормы 1. Поскольку $K|a^r\rangle = |a^r\rangle$ и, по предположению, $\langle a^r|b\rangle = 0$, то

$$\langle a^r|(K|b)\rangle = (\langle a^r|K^+)(K|b)\rangle = \langle a^r|b\rangle^* = 0,$$

и, следовательно, $|b^r\rangle$ ортогонален к $|a^r\rangle$. Затем выбирается произвольный вектор $|c\rangle$, ортогональный к $|a^r\rangle$ и $|b^r\rangle$, и строится вектор $|c^r\rangle$. Эту процедуру повторяют до тех пор, пока не будет образован полный набор базисных векторов.

Вещественные представления имеют ряд интересных свойств. Оператором обычного комплексного сопряжения в этих представлениях является оператор K. Всякий вещественный оператор описывается вещественной матрицей; два комплексно сопряженных оператора реализуются комплексно сопряженными матрицами. Унитарные матрицы, связывающие два вещественных представления, вещественны.

Если $K^2 = -1$ (n нечетно), то вещественные векторы отсутствуют. Однако так как $K = -K^+$, то для любого вектора $|u\rangle$ имеем

$$\langle u|(K|u)\rangle = \langle u|(K^+|u)\rangle = -\langle u|(K|u)\rangle = 0,$$

так что мы получили интересное свойство:

Два комплексно сопряженных вектора $|\rangle$ и $K|\rangle$ *ортогональны.*

Кроме того, если вектор $|b\rangle$ ортогонален двум комплексно сопряженным векторам $|a\rangle$ и $K|a\rangle$, то это свойство справедливо и для комплексно сопряженного вектора $K|b\rangle$. Из этого легко проверяемого свойства можно получить, используя те же рассуждения, что и в случае $K^2 = 1$, что существует базис, целиком построенный из комплексно сопряженных векторов.

§ 20. Принцип микрообратимости

Точно так же как ранее постулировалась инвариантность уравнения движения заданной системы относительно некоторых пространственных преобразований (§ 13), мы можем постулировать его обратимость по отношению ко времени, т. е. если

$|\psi(t)\rangle = U(t, 0)|\psi\rangle$ описывает возможное состояние системы, то вектор

$$|\psi(t)\rangle_{\text{rev}} = KU(-t, 0)|\psi\rangle$$

также представляет возможное состояние системы и, следовательно, с точностью до фазового множителя этот вектор совпадает с $U(t, 0)K|\psi\rangle$. Предполагая, что это свойство справедливо для всех $|\psi\rangle$, постулат обратимости по отношению к времени можно записать в виде

$$U(t, 0)K = e^{i\alpha(t)}KU(-t, 0).$$

Этот постулат применим только к консервативным системам. Если H — гамильтониан системы, то

$$U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}, \quad U(-t, 0) = e^{+iHt/\hbar} = U^{+}(t, 0),$$

откуда имеем

$$U(t, 0) = e^{i\alpha}(KU^{+}(t, 0)K^{+}). \tag{89}$$

Домножив обе части этого равенства на K слева и на K^{+} справа и учитывая, что $K^2 = K^{+2} = (-1)^n$, находим, что

$$U^{+}(t, 0) = e^{i\alpha}(KU(t, 0)K^{+}).$$

Сравнив это соотношение с равенством, получаемым при эрмитовом сопряжении соотношения (89),

$$U^{+}(t, 0) = e^{-i\alpha}(KU(t, 0)K^{+}),$$

получаем, что $e^{i\alpha}$ может принимать только значения ± 1, но поскольку $e^{i\alpha}$ — непрерывная функция t, равная 1 при $t = 0$, то мы имеем $e^{i\alpha} = 1$. Применяя (89) к инфинитезимальному оператору

$$U(dt, 0) = 1 - \frac{i}{\hbar}H\,dt,$$

получаем

$$1 - \frac{i}{\hbar}H\,dt = K\left[1 + \frac{i}{\hbar}H\,dt\right]K^{+},$$

т. е.

$$KHK^{+} = H. \tag{90}$$

Итак, *если уравнение движения консервативной системы обратимо во времени, то гамильтониан вещественен и наоборот* (обратное доказано в § 17).

Постулат обратимости под названием *принцип микрообратимости* обычно формулируется несколько отличным от выше приведенного способом. Эта формулировка такова.

Пусть w — вероятность обнаружить консервативную систему в некотором состоянии $|\chi\rangle$ в момент времени t, если она в момент времени t_0 находилась в состоянии $|\varphi\rangle$. Пусть w_{rev} — вероятность обнаружить систему в состоянии $K|\varphi\rangle$ в момент времени t, если она в момент времени t_0 находилась в состоянии $K|\chi\rangle$. Тогда принцип микрообратимости утверждает, что

$$w_{\text{rev}} = w \tag{91}$$

для любых $|\varphi\rangle$, $|\chi\rangle$, t_0 и t.

Условие (91) может быть записано в виде

$$|(\langle\varphi|K^+)(U(t, t_0)K|\chi\rangle)|^2 = |\langle\chi|U(t, t_0)|\varphi\rangle|^2.$$

Это соотношение можно сравнить с соотношением (58). Поскольку

$$(\langle\varphi|K^+)(UK|\chi\rangle) = \langle\varphi|(K^+UK)|\chi\rangle^* = \langle\chi|(K^+U^+K)|\varphi\rangle,$$

то его можно переписать в виде

$$|\langle\chi|(K^+U^+K)|\varphi\rangle| = |\langle\chi|U|\varphi\rangle|.$$

Так как последнее равенство выполняется при всех $|\varphi\rangle$ и $|\chi\rangle$, то U и K^+U^+K совпадают с точностью до фазового множителя (теорема II). Аргументация, подобная той, которая применялась выше к множителю $e^{i\alpha}$, показывает, что и этот фазовый множитель равен единице. Таким образом, принцип микрообратимости требует выполнения равенства

$$U(t, t_0) = K^+U^+(t, t_0)K, \tag{92}$$

которое в случае инфинитезимального оператора U как раз является условием инвариантности гамильтониана (90)[1]).

Обычно предполагается, что любая квантовая система, не взаимодействующая с внешними полями, удовлетворяет принципу микрообратимости. Вплоть до настоящего времени эта гипотеза не противоречит данным эксперимента. В присутствии внешнего поля принцип микрообратимости выполняется или нет в зависимости от того, является ли поле инвариантным или нет по отношению к обращению времени. Электростатическое поле обладает этим свойством инвариантности. Это легко понять, так как источниками этого поля являются фиксированные электрические заряды, а распределение статического заряда не меняется при обращении времени. С другой стороны, источниками статического магнитного поля являются фиксированные

[1]) Поскольку $U^+(t_2, t_1) = U(t_1, t_2)$, то уравнение (92) можно записать также в виде

$$U(t_2, t_1) = K^+U(t_1, t_2)K.$$

электрические токи: обращение времени обращает токи, а значит, и поля. Следовательно, принцип микрообратимости нарушается в присутствии магнитного поля даже в том случае, когда оно не зависит от времени.

§ 21. Следствие: вырождение Крамерса

Вещественность гамильтониана H, как и любая другая симметрия, отражается в наличии специальных свойств в задаче на собственные значения.

Если $|u\rangle$ — собственный вектор оператора H

$$H|u\rangle = E|u\rangle,$$

то комплексно сопряженный вектор $K|u\rangle$ также является собственным для H и соответствует тому же собственному значению, т. е. по предположению

$$HK = KH,$$

и так как E — вещественное число, то

$$H(K|u\rangle) = K(H|u\rangle) = (KE|u\rangle) = E(K|u\rangle).$$

Следовательно, подпространство $\mathscr{E}_E$, соответствующее собственному значению E, инвариантно относительно действия антиунитарного преобразования K, и можно применить результаты § 19. Следует рассмотреть два случая в соответствии с $K^2 = \pm 1$.

1-й случай. $K^2 = +1$ (четное число спинов 1/2).

В каждом из подпространств $\mathscr{E}_E$ можно выбрать ортонормированный базис, все векторы которого вещественны. Таким образом, H имеет (по крайней мере) один базис, все векторы которого вещественны.

2-й случай. $K^2 = -1$ (нечетное число спинов 1/2).

В каждом из подпространств $\mathscr{E}_E$ можно выбрать ортонормированный базис, состоящий из пар комплексно сопряженных векторов. Итак, каждое из подпространств $\mathscr{E}_E$ имеет четную размерность: *каждое собственное значение гамильтониана H по крайней мере двукратно вырождено и его вырождение обязательно имеет четную кратность.* Вырождение такого типа называют *вырождением Крамерса.*

Некоторые системы не имеют симметрий, отличных от инвариантности относительно обращения времени. Пример этому дает система атомов в асимметрической кристаллической решетке. Такой атом можно рассматривать как систему, находящуюся в чисто электростатическом внешнем поле. Гамильтониан такого атома вещественен. Если он содержит нечетное

число электронов, то все энергетические уровни двукратно вырождены. Это вырождение можно устранить введением магнитного поля.

§ 22. Вещественный гамильтониан, инвариантный относительно вращений

Если гамильтониан H обладает другими свойствами симметрии помимо обращения времени, то результаты предыдущего пункта остаются справедливыми, хотя в значительной степени теряют свой интерес. Вигнер [1]) систематически изучал свойства H в случае, когда:

(i) H вещественен: $[K, H] = 0$;

(ii) H инвариантен относительно преобразований группы линейных преобразований: $[T_i, H] = 0$;

(iii) преобразования T_i коммутируют с обращением времени: $[K, T_i] = 0$.

Мы рассмотрим здесь только случай, когда группой инвариантности является группа вращений [2]).

Пусть Y — оператор вращения на угол π вокруг оси y (не следует смешивать этот оператор с введенным выше оператором $Y^{(S)}$ вращения одних только спинов). Положим

$$K_y \equiv Y^\dagger K \equiv e^{i\pi J_y/\hbar} K. \tag{93}$$

Операторы $Y^\dagger$ и K коммутируют с J^2 и антикоммутируют с J_z.

---

[1]) *E. P. Wigner*, Göttinger Nachrichten 31, 546 (1932) (см. *Е. Вигнер.* Теория групп. М., ИЛ., 1961, гл. 26. *Прим. перев.*)

[2]) Для заданной группы G вещественность H сказывается либо на удвоении G-вырождения, либо в возможности диагонализации оператора H в представлении, базисные векторы которого удовлетворяют некоторому условию вещественности. Детальная формулировка результата состоит в следующем (см. работу Вигнера, цитированную выше).

Пусть $G^{(l)}$ — неприводимое представление G, а $G^{(l)*}$ — сопряженное представление. Оператор K, действуя на вектор одного из этих представлений, дает вектор из другого. Тогда $G^{(l)}$ и $G^{(l)*}$ либо эквивалентны, либо неэквивалентны. В первом случае матрица S, позволяющая перейти от одного представления к другому ($G^{(l)*} = SG^{(l)}S^\dagger$), имеет следующее свойство: $SS^* = \pm 1$. Обозначим G представление группы G в подпространстве, соответствующем заданному собственному значению гамильтониана H. Следует рассмотреть три случая:

(а) если $G^{(l)*}$ не эквивалентно $G^{(l)}$, то оба представления одинаковое число раз встречаются в разложении на неприводимые компоненты (двукратное вырождение);

(б) если $G^{(l)*} \approx G^{(l)}$ и $SS^*K^2 = -1$, то $G^{(l)}$ встречается четное число раз в разложении G (двукратное вырождение);

(в) если $G^{(l)*} \approx G^{(l)}$ и $SS^*K^2 = +1$, то все базисные векторы каждой компоненты $G^{(l)}$ представления G можно выбрать удовлетворяющими условию «вещественности»: $KS|u\rangle = |u\rangle$.

Все представления группы вращений соответствуют случаю (в).

Следовательно, K_y коммутирует с J^2 и J_z. Этот оператор коммутирует также с J_+ и J_-

$$Y^+K(J_x \pm iJ_y) = Y^+(-J_x \pm iJ_y)K = (J_x \pm iJ_y)Y^+K.$$

Более того, поскольку $[Y, K] = 0$ и $Y^2 = K^2 = (-1)^n$ (ср. соотношение (88)), то

$$K_y^2 = 1. \tag{94}$$

Антиунитарное преобразование K_y можно рассматривать как комплексное сопряжение, точно так же как рассматривалось K в § 19. Для того чтобы различать K_y и K, мы будем использовать кавычки для нового типа сопряжения. Таким образом, «вещественный» (линейный) оператор — оператор, коммутирующий с K_y. Вектором, «комплексно сопряженным» к вектору $|\rangle$, будет, по определению, вектор $K_y|\rangle$. Поскольку $K_y^2 = 1$, то «вещественные» векторы и «вещественные» представления существуют. Действие «вещественного» оператора на «вещественный» вектор дает «вещественный» вектор. В «вещественном» представлении «вещественный» оператор описывается вещественными матрицами.

Поскольку J^2 и J_z — «вещественные» операторы, мы можем построить базис в пространстве момента импульса (jj), все векторы которого «вещественны». Поскольку J_+ и J_- также «вещественны», то и векторы стандартного базиса, который может быть построен из этих векторов методом, развитым в § XIII. 6, также все «вещественны».

Пусть $|\tau j\mu\rangle$ — векторы «вещественного» стандартного базиса. Если H инвариантен относительно вращений и отражения времени, то он коммутирует с J и K_y и описывается в представлении $\{\tau j\mu\}$ вещественной матрицей вида (52), т. е.

$$\langle \tau j\mu \mid H \mid \tau' j'\mu' \rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}H^{(j)}_{\tau\tau'}$$

с вещественными $H^{(j)}_{\tau\tau'}$. Отсюда следует *наличие вращательного вырождения и существование у H по крайней мере одной ортонормированной системы собственных векторов, образующих «вещественный» базис.*

«Вещественный» базис в $\mathscr{E}$ можно построить, взяв тензорные произведения базисных векторов в более простых пространствах. Предположим, что мы имеем

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2 \otimes \ldots$$

и что в каждом пространстве $\mathscr{E}_i$ определены операторы вращений и обращения времени. С каждым $\mathscr{E}_i$ связан оператор «комплексного сопряжения» $K^{(i)}_y = Y^{(i)+}K^{(i)}$, а оператор K_y для всего

пространства является тензорным произведением этих операторов

$$K_y = K_y^{(1)} K_y^{(2)} \ldots .$$

Тензорное произведение «вещественных» векторов определяет «вещественный» вектор. В частности, мы можем образовать множество «вещественных» базисных векторов в $\mathscr{E}$, взяв тензорные произведения векторов, образующих «вещественный» стандартный базис момента импульса в каждом из пространств сомножителей. Исходя из этого базиса в $\mathscr{E}$, мы можем образовать стандартный базис полного момента импульса в этом пространстве путем сложения моментов импульса. Поскольку все коэффициенты Клебша — Гордана вещественны, все векторы построенного таким образом стандартного базиса также «вещественны».

Мы закончим эту главу замечанием о «вещественности» сферических функций.

Пусть $\omega = (\theta, \varphi)$ — угловые координаты вектора $\boldsymbol{r}$ частицы, а $Y_l^m(\omega)$ — сферические функции, описывающие состояние момента импульса (lm). В этом частном случае ($\hbar = 1$)

$$K_y = \mathrm{e}^{-i\pi l_y} K_0,$$

так что (уравнения (Б.92) и (В.62))

$$K_y Y_l^m(\omega) = \mathrm{e}^{-i\pi l_y} Y_l^{m*}(\omega) = \mathrm{e}^{-i\pi l_y} (-1)^m Y_l^{-m}(\omega) = (-1)^l Y_l^m(\omega).$$

Итак, сферическая функция Y_l^m «вещественна» при четном l и «чисто мнима» при нечетном l. С другой стороны, функции

$$\mathscr{Y}_l^m(\omega) \equiv i^l Y_l^m(\omega)$$

образуют «вещественный» стандартный базис для орбитального момента импульса.

Пусть $\omega_p = (\theta_p, \varphi_p)$ — угловые координаты импульса $\boldsymbol{p}$, а $Y_l^m(\omega_p)$ — сферическая гармоника, описывающая состояние момента импульса (lm) в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$. Можно показать (задача 10), что

$$K_0 = S_0 K_p,$$

где S_0 — оператор четности (ур. (45)), а K_p — оператор комплексного сопряжения в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$. Тогда

$$K_y Y_l^m(\omega_p) = Y_l^m(\omega_p).$$

Следовательно, $Y_l^m(\omega_p)$ образуют «вещественный» стандартный

базис для орбитального момента импульса. Эти рассмотрения «вещественности» без труда можно распространить на общий случай неприводимых тензорных операторов (см. задачу 12).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Предположим, что пространство $\mathscr{E}$ векторов состояния системы представляет собой прямую сумму $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 + \ldots$ некоторого числа подпространств, инвариантных по отношению к множеству физических наблюдаемых системы. Показать, что проекторы P_1, P_2, ... на эти подпространства коммутируют с каждой физической наблюдаемой и что не все векторы из $\mathscr{E}$ являются одновременными собственными векторами полного набора коммутирующих физических наблюдаемых.

2. Показать, что оператор S_0, определенный равенством (45), удовлетворяет соотношениям (43) и (44) и, в частности, соотношению $S_0 \boldsymbol{p} S_0^{\dagger} = -\boldsymbol{p}$.

3. Оператор отражения в плоскости, перпендикулярной вектору $\boldsymbol{u}$, в случае частиц спина $1/2$ является произведением оператора, действующего только на орбитальные переменные, и оператора, действующего только на спиновые переменные. Показать, что при специальном выборе фазового множителя последний из упомянутых операторов равен $(\boldsymbol{\sigma u})$. Показать, что произведение $(\boldsymbol{\sigma v})(\boldsymbol{\sigma u})$, которое описывает два последовательных отражения в плоскостях, перпендикулярных векторам $\boldsymbol{u}$ и $\boldsymbol{v}$, равно оператору, соответствующему вращению спина на угол $2(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ вокруг оси $(\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v})/|\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v}|$.

4. Поток частиц спина s рассеивается на потенциале, зависящем от спина. Пусть $\boldsymbol{p}_i$ — начальный импульс. Частицы, рассеянные в заданном направлении, выделяются диафрагмой. Пусть $\boldsymbol{p}_f$ — импульс этих частиц, а D — плоскость рассеяния, т. е. плоскость, в которой лежат векторы $\boldsymbol{p}_i$ и $\boldsymbol{p}_f$. Мы предполагаем, что налетающие частицы не поляризованы, так что их спиновое состояние описывается оператором плотности $\rho_i = 1/(2s+1)$. Показать, что если потенциал взаимодействия *инвариантен относительно вращений и отражения в начале координат*, то оператор плотности ρ_f, описывающий спиновое состояние рассеянных частиц, симметричен относительно отражения в плоскости D.

5. Показать, что оператор плотности, описывающий спиновое состояние частицы спина $1/2$, может быть представлен в виде

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{P\sigma}),$$

где $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — удвоенный вектор спина частицы, а $\boldsymbol{P}$ — вектор, длина которого лежит между 0 и 1 и который полностью определяет состояние поляризации частицы.

Возвращаясь к задаче 4 и предполагая, что $s = 1/2$, показать, что вектор $\boldsymbol{P}_f$, определяющий поляризацию рассеянных частиц, *перпендикулярен плоскости рассеяния*.

6. Показать, что при добавлении к гамильтониану системы произвольной вещественной функции времени оператор эволюции $U(t, t_0)$ домножается только на фазовый множитель.

7. При галилеевском преобразовании системы координат переменные $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$ частицы переходят в $\boldsymbol{r} - \boldsymbol{v}t$, $\boldsymbol{p} - m\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{s}$ соответственно. Показать, что такое преобразование задается оператором

$$G(\boldsymbol{v}, t) = \exp[i\boldsymbol{v}(m\boldsymbol{r} - \boldsymbol{p}t)/\hbar].$$

Галилеевское преобразование системы N частиц описывается оператором $G(v, t) = \exp[iv(M\boldsymbol{R} - \boldsymbol{P}t)/\hbar]$, где M, $\boldsymbol{R}$ и $\boldsymbol{P}$ — масса, оператор координаты и оператор импульса центра масс.

(*N. B.* Для заданного значения t галилеевские преобразования образуют группу. При принятом соглашении о фазе операторы преобразований также образуют группу.)

Уравнение движения инвариантно относительно этого преобразования, если

$$G^{+}(\boldsymbol{v}, t)\, U(t, t_0)\, G(\boldsymbol{v}, t_0) = U(t, t_0) \times \text{фазовый множитель.}$$

Показать, что это условие эквивалентно «условию галилеевской инвариантности уравнения Шредингера»

$$G^{+}(\boldsymbol{v}, t)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right]G(\boldsymbol{v}, t) = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right] + f,$$

где f — произвольная вещественная функция времени, и что это условие действительно выполняется для шредингеровского гамильтониана (при этом $f = 0$).

8. Показать, что операторы трансляций и вращений и оператор отражений S_0 (определение (45)) коммутируют с оператором обращения времени K и что это свойство не зависит от выбора произвольной фазы, имеющейся в определении K.

9. Показать, что если квадрат антиунитарного оператора равен постоянной, то она равна либо $+1$, либо -1.

10. Пусть K_p — оператор комплексного сопряжения в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$, K_0 — оператор комплексного сопряжения в представлении $\{\boldsymbol{r}\}$, S_0 — оператор отражения (определение (45)). Показать, что $K_0 = S_0 K_p$. Вывести, что при обращении времени волновая функция $\Phi(\boldsymbol{p})$ переходит в

$$K\Phi(\boldsymbol{p}) = \Phi^{*}(-\boldsymbol{p}).$$

11. Пусть имеется система, инвариантная относительно обращения времени. Пусть B — чисто мнимая (см. § 19) наблюдаемая системы (импульс, спин, орбитальный момент импульса и т. п.). Показать, что:

(i) если стационарное состояние не вырождено, то среднее значение наблюдаемой B в этом состоянии равно нулю;

(ii) след проекции наблюдаемой B на подпространство, соответствующее любому собственному значению энергии, равен нулю.

12. Обозначим $T_q^{(k)}$ ($q = -k, -k+1, \ldots, +k$) стандартные компоненты неприводимого тензорного оператора $\boldsymbol{T}^{(k)}$. По определению, комплексно сопряженным к оператору $\boldsymbol{T}^{(k)}$ является тензорный оператор, компонента $q = 0$ ко-

торого есть образ при обращении времени компоненты $T_0^{(k)}$ (при таком определении декартовы компоненты вещественных векторных операторов инвариантны относительно обращения времени, а компоненты чисто мнимых векторных операторов меняют знак). Показать, что стандартные компоненты оператора, комплексно сопряженного к $\boldsymbol{T}^{(k)}$, являются «комплексно сопряженными» (в смысле § 22) соответствующим компонентам оператора $(-1)^k\boldsymbol{T}^{(k)}$ и что, в частности, в «вещественном» стандартном представлении матричный элемент $\left\langle \tau j\mu \left| T_q^{(k)} \right| \tau' j' \mu' \right\rangle$ веществен, если $i^k\boldsymbol{T}^{(k)}$ веществен, и чисто мнимый, если $i^k\boldsymbol{T}^{(k)}$ — таковой.

(*N. B.* Это свойство имеет непосредственное приложение в задачах об угловых корреляциях, ибо оно дает, с точностью до знака, относительные фазы вкладов различных мультиполей.)

«Если блюда, которые я вам предлагаю, плохо приготовлены, то виноват в этом не столько мой повар, сколько химия, еще не вышедшая из детского возраста.»

А. Франс «Харчевня королевы Педок»

ЧАСТЬ IV

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ

ГЛАВА XVI
СТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

§ 1. Общее введение к четвертой части

Незначительное число задач в квантовой механике, которые могут быть решены точно, относятся к очень простым и специальным системам. Практически ни одну из физических систем нельзя изучать без использования подходящего приближенного метода. Искусство физика в большой степени состоит в умении определить относительную значимость различных факторов в данной физической системе и в выборе подходящего приближенного метода. Вообще говоря, для каждой задачи существует свой приближенный метод, и рассмотреть все возможные методы мы не можем. В данной книге излагаются только достаточно общие методы, которые заслуживают систематического изучения. Мы уже рассматривали классическое приближение и метод ВКБ в главе VI и метод фазовых сдвигов для задач рассеяния в главе X. Другие методы будут предметом исследования в этой, четвертой, части нашей книги.

Математическое описание квантовой системы состоит в определении ее оператора эволюции $U(t, t_0)$ или по крайней мере в определении основных свойств этого оператора. Если гамильтониан H не зависит от времени, то проблема сводится к решению задачи на собственные значения для оператора H, так как в этом случае

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

и свойства $U(t, t_0)$ непосредственно связаны со свойствами H. Ситуация становится более сложной, когда H зависит от времени. Однако ясно, что и в этом случае важную роль в определении свойств U будут играть собственные значения и собственные функции H, которые тоже будут зависеть от времени.

Как правило, задачи рассеяния, которые относятся к непрерывному спектру, значительно сложнее задач, относящихся к связанным состояниям. Теория рассеяния будет рассматриваться в последней главе этой части (гл. XIX). В остальных главах (гл. XVI — XVIII) в основном исследуются связанные

состояния, хотя развитые в них методы могут использоваться и для изучения состояний непрерывного спектра.

Задачи о связанных состояниях можно разделить на два класса. Одни связаны с определением стационарных состояний, иначе говоря, с решением задачи на собственные значения оператора H. К другому классу относятся задачи о переходах между состояниями. Для решения задачи на собственные значения обычно используют один из трех методов. Метод ВКБ основан на квазиклассическом приближении — приближении больших квантовых чисел и малых длин волн. Стационарная теория возмущений основана на точном решении задачи на собственные значения для некоторого оператора H_0, мало отличающегося от H, собственные значения и собственные функции H выражаются в виде рядов по разности $H - H_0$. Если упомянутые методы не применимы, то можно воспользоваться вариационным методом при условии, что имеется хорошее априорное представление об общем виде искомых собственных функций. В настоящей главе рассматривается стационарная теория возмущений, а в главе XVIII — вариационный метод. Основные методы исследования эволюции связанных состояний, когда гамильтониан зависит от времени, и, в частности, вычисление переходов между состояниями, изложены в главе XVII.

Раздел I. ВОЗМУЩЕНИЕ НЕВЫРОЖДЕННОГО УРОВНЯ

§ 2. Разложение по степеням возмущения

Предположим, что гамильтониан H можно записать в виде суммы «невозмущенного гамильтониана» H_0 и возмущения, которое принято записывать в форме λV, где λ — вещественный параметр, а V — так же как и H не зависящий от времени эрмитов оператор

$$H = H_0 + \lambda V. \tag{1}$$

Предположим, что проблема собственных значений для оператора H_0 решена и

$$E_1^0, E_2^0, \ldots, E_i^0, \ldots —$$

последовательность его собственных значений, а $|E_i^0\alpha\rangle$ — соответствующий набор собственных векторов; квантовое число α различает собственные векторы, отвечающие вырожденному собственному значению:

$$H_0 |E_i^0\alpha\rangle = E_i^0 |E_i^0\alpha\rangle. \tag{2}$$

Спектр H непрерывно меняется с изменением λ и совпадает со спектром H_0 при $\lambda = 0$. Рассмотрим данное собственное зна-

чение E_a^0 оператора H_0. Мы хотим вычислить собственное значение (или значения) H, которое стремится к E_a^0, когда $\lambda \to 0$, и определить соответствующие собственные состояния оператора H. Для упрощения записи будем считать, что спектр H_0 чисто дискретный; в действительности нижеследующие рассуждения остаются справедливыми и в том случае, если часть спектра H_0 непрерывна, лишь бы E_a^0 принадлежало дискретному спектру.

Если *собственное значение* E_a^0 *не вырождено*, то метод вычисления особенно прост. В настоящем разделе мы будем рассматривать именно этот случай. Пусть E — невырожденное собственное значение H, которое стремится к E_a^0, когда $\lambda \to 0$. Соответствующий ему собственный вектор $|\psi\rangle$ определен с точностью до константы, которую можно фиксировать произвольным условием. Мы примем следующее определение $|\psi\rangle$:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \tag{3}$$

$$\langle 0|\psi\rangle = \langle 0|0\rangle = 1, \tag{4}$$

где использовано обозначение $|E_a^0\rangle = |0\rangle$. Согласно этому определению $|\psi\rangle$ стремится к $|0\rangle$, когда $\lambda \to 0$.

Если возмущение λV достаточно мало, то разумно предположить, что E и $|\psi\rangle$ можно разложить в быстро сходящиеся степенные ряды по λ, т. е. можно записать:

$$E = E_a^0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \ldots + \lambda^n\varepsilon_n + \ldots, \tag{5}$$

$$|\psi\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \ldots + \lambda^n|n\rangle + \ldots. \tag{6}$$

Сохраняя только первые члены этих рядов, получаем приближенные выражения для E и $|\psi\rangle$, приближение будет тем лучше, чем быстрее сходится ряд.

Метод теории возмущений заключается в определении коэффициентов разложений (5) и (6). Для этого мы подставим выражения (1), (5) и (6) в обе части уравнения (3), которое тем самым превращается в равенство между двумя степенными рядами по λ. Для того чтобы это равенство выполнялось, необходимо, чтобы коэффициенты при каждой степени λ были по отдельности равны. В результате получаем уравнения

$$(H_0 - E_a^0)|0\rangle = 0, \tag{7^0}$$

$$(H_0 - E_a^0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0, \tag{7^1}$$

$$(H_0 - E_a^0)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0, \tag{7^2}$$

. . . . . .

$$(H_0 - E_a^0)|n\rangle + (V - \varepsilon_1)|n-1\rangle \ldots - \varepsilon_n\ 0\rangle = 0, \tag{7^n}$$

. . . . . .

Переписав тем же способом условие (4), получаем

$$\langle 0\,|\,1\rangle = \langle 0\,|\,2\rangle = \ldots = \langle 0\,|\,n\rangle = \ldots = 0. \tag{8}$$

Уравнение (7^0) определяет собственное значение и собственный вектор в нулевом порядке. Вместе с условиями (8) уравнение (7^1) определяет поправки первого порядка к этим величинам, уравнение (7^2) — поправки второго порядка, ..., уравнение (7^n) — поправки n-го порядка.

Покажем, что действительно уравнение (7^n) определяет ε_n и $|n\rangle$ в терминах поправок низшего порядка. Для этого спроектируем уравнение (7^n) на базисные векторы H_0. Проектируя на $|0\rangle$ и используя (8), получаем

$$\varepsilon_n = \langle 0\,|\,V\,|\,n-1\rangle. \tag{9}$$

Проектируя на другие базисные векторы H_0, получаем соответствующие компоненты вектора $|n\rangle$ вдоль этих векторов

$$\langle E^0\alpha\,|\,n\rangle = \frac{1}{E_a^0 - E^0}\,[\langle E^0\alpha\,|\,(V-\varepsilon_1)\,|\,n-1\rangle - \\ - \varepsilon_2\langle E^0\alpha\,|\,n-2\rangle - \ldots - \varepsilon_{n-1}\langle E^0\alpha\,|\,1\rangle] \quad (E_a^0 \neq E^0).$$

Поскольку $\langle 0|n\rangle = 0$, то вектор $|n\rangle$ полностью определен. Удобно обозначить

$$Q \equiv 1 - |\,0\rangle\langle 0\,| = \sum_{E^0 \neq E_a^0} \sum_{\alpha} |\,E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha\,|$$

и

$$\frac{Q_0}{a} \equiv Q_0 \frac{1}{E_a^0 - H^0} Q_0 = \sum_{E^0 \neq E_a^0} \frac{\sum\limits_{\alpha} |\,E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha\,|}{E_a^0 - E_0}. \tag{10}$$

Используя эти обозначения, можно записать

$$|\,n\rangle = \frac{Q_0}{a}\,[(V-\varepsilon_1)\,|\,n-1\rangle - \varepsilon_2\,|\,n-2\rangle - \ldots - \varepsilon_{n-1}\,|\,1\rangle]. \tag{11}$$

Уравнения (9) и (11) эквивалентны уравнению (7^n), что и завершает доказательство.

§ 3. Возмущение первого порядка

Поправки первого порядка следуют из уравнения (7^1). Они получаются, если записать уравнения (9) и (11) в частном случае $n = 1$.

Уравнение (9) дает поправку первого порядка к уровню энергии

$$\varepsilon_1 = \langle 0\,|\,V\,|\,0\rangle, \tag{12}$$

откуда получаем выражение для энергии в первом порядке

$$E = \langle 0 | H | 0 \rangle + O(\lambda^2), \tag{13}$$

т. е. *среднее значение гамильтониана H, вычисленное на собственном векторе невозмущенного гамильтониана H_0.*

Уравнение (11) дает поправку первого порядка к собственному вектору

$$| 1 \rangle = \frac{Q_0}{a} (V - \varepsilon_1) | 0 \rangle,$$

но поскольку $Q_0 | 0 \rangle = 0$, это выражение сводится к

$$| 1 \rangle = \frac{Q_0}{a} V | 0 \rangle. \tag{14}$$

Вектор $|\psi\rangle$ в первом порядке дается выражением

$$| \psi \rangle = \left(1 + \lambda \frac{Q_0}{a} V\right) | 0 \rangle + O(\lambda^2), \tag{15}$$

а его норма $\| |\psi\rangle \|$ равна

$$\| |\psi\rangle \|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \langle 0 | 0 \rangle + \langle \psi | Q_0 | \psi \rangle \approx$$

$$\approx \langle 0 | 0 \rangle + \lambda^2 \langle 1 | 1 \rangle = 1 + \lambda^2 \langle 0 | V \frac{Q_0}{a^2} V | 0 \rangle = 1 + O(\lambda^2).$$

Согласно (14) коэффициенты поправок первого порядка к $|0\rangle$ вдоль других базисных векторов H_0 даются уравнением

$$\lambda \langle E^0 \alpha | 1 \rangle = \frac{\langle E^0 \alpha | (\lambda V) | 0 \rangle}{E_a^0 - E^0} \qquad (E^0 \neq E_a^0). \tag{16}$$

Следовательно, коэффициент поправки, пропорциональной $|E^0\alpha\rangle$, равен матричному элементу возмущения, связывающему $|0\rangle$ с $|E^0\alpha\rangle$, деленному на *разность энергий* этих двух невозмущенных состояний. Наименьшая из этих величин определяет скорость сходимости ряда теории возмущений.

§ 4. Основное состояние атома гелия

В качестве первого примера [1]) применения метода теории возмущений, вычислим энергию основного состояния атома гелия или, говоря более общим образом, энергию основного состояния любого $(Z-2)$-кратно ионизированного атома. Такой атом состоит из ядра с зарядом Ze и двух электронов. Ядро предполагается бесконечно тяжелым, так что получаем гамильтониан двух электронов в потенциале

$$-\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}},$$

[1]) Мы используем пример из книги: *L. Pauling, E. B. Wilson*, loc. cit. (см. первую сноску к § XIV. 12).

где r_1 и r_2 — координаты первого и второго электронов, а $r_{12} = |r_1 - r_2|$ — расстояние между электронами.

Если пренебречь потенциалом взаимного отталкивания e^2/r_{12}, то гамильтониан системы сводится к гамильтониану двух независимых частиц в кулоновском поле $-Ze^2/r$, для которого задача на собственные значения может быть решена точно. Мы возьмем этот гамильтониан в качестве «невозмущенного», а потенциал e^2/r_{12} будем рассматривать как возмущение. В основном состоянии H_0 оба электрона находятся в состоянии $1s$.

Пусть E_{H} — энергия связи в основном состоянии атома водорода. Тогда энергия основного состояния H_0 равна сумме энергий двух электронов

$$E_a^0 = -2Z^2E_{\text{H}}.$$

Соответствующая собственная функция равна произведению собственных функций каждого электрона (см. § Б. 3)

$$\Phi_a(r_1, r_2) = e^{-(r_1+r_2)/a}/\pi a^3,$$

где

$$a = \frac{a_0}{Z} = \frac{\hbar^2}{Zme^2} \qquad (\approx Z^{-1} \cdot 0{,}53 \cdot 10^{-8}\ см).$$

Поправки к энергии от возмущения $V = e^2/r_{12}$ в первом порядке вычисляются по формуле (12) ($\lambda = 1$)

$$\varepsilon_1 = \int \Phi_a V \Phi_a\, dr_1\, dr_2 = \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \int \frac{e^{-2(r_1+r_2)/a}}{|r_1 - r_2|}\, dr_1\, dr_2. \qquad (17)$$

Это электростатическая энергия двух сферических распределений электричества с плотностями $-e\rho_1(r_1)$ и $-e\rho_2(r_2)$, где

$$\rho_1(r) = \rho_2(r) = e^{-2r/a}/\pi a^3. \qquad (18)$$

Для вычисления интеграла

$$I = \int dr_1 \int dr_2 \frac{\rho_1(r_1)\,\rho_2(r_2)}{|r_1 - r_2|}$$

мы используем разложение (Б. 99). После интегрирования по углам получаем

$$I = 16\pi^2 \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2\, \rho_1(r_1)\,\rho_2(r_2)\, r_1^2 r_2^2/r_> =$$

$$= 16\pi^2 \int_0^\infty \rho_1(r_1)\, r_1\, dr_1 \left\{ \int_0^{r_1} \rho_2(r_2)\, r_2^2\, dr_2 + r_1 \int_{r_1}^\infty \rho_2(r_2)\, r_2\, dr_2 \right\}. \qquad (19)$$

Подставляя (18) и вычисляя I, находим, что поправка $\varepsilon_1 = e^2 I$ равна

$$\varepsilon_1 = \frac{5}{4} Z E_{\text{H}}. \tag{20}$$

Приближение тем лучше, чем меньше энергия взаимного отталкивания электронов по сравнению с энергией притяжения к ядру, т. е. чем больше Z. Это проиллюстрировано в табл. I,

Таблица I

Энергии связи атомов He, Li^+, Be^{++} в основном состоянии *)

Атом	1	2	3	4	5	6
	Z	E_a^0	ε_1	$E_{\text{pert}} = E_a^0 + \varepsilon_1$	E_{var}	E_{exp}
He	2	−108	34	−74	−76,6	−78,6
Li^+	3	−243,5	50,5	−193	−195,6	−197,1
Be^{++}	4	−433	67,5	−365,5	−368,1	−370,0

*) Энергии приведены в электрон-вольтах. Столбцы 2, 3, 4 дают невозмущенную энергию, поправку первого порядка и их сумму соответственно. Столбец 5 содержит результат вычисления вариационным методом из § XVIII. 6, последний столбец — экспериментальное значение энергии основного состояния (по книге: *L. Pauling, E. B. Wilson*, loc. cit.)

где приведены экспериментально наблюдаемые энергии связи для основных состояний He, Li^+ и Be^{++} и результаты вычислений по теории возмущений. Разложение по теории возмущений сходится быстрее, чем можно было бы ожидать, рассматривая ситуацию *a priori*, и вычисление энергии связи в первом порядке уже дает разумное согласие с наблюдаемой величиной даже в случае гелия ($Z = 2$).

§ 5. Кулоновская энергия атомных ядер

В атомных ядрах, где расстояние между нуклонами порядка 10^{-13} *см*, силы, действующие между нуклонами и характеризующие ядерные взаимодействия, значительно превосходят силы кулоновского отталкивания протонов. Таким образом, кулоновское взаимодействие можно рассматривать как возмущение. Обозначим H_0 сумму кинетической энергии нуклонов и потенциальной энергии чисто ядерного происхождения. Возмущение V состоит из $^1/_2 Z(Z-1)$ членов кулоновского отталкивания Z протонов ядра

$$V = \sum_{i<j\leqslant z} \frac{e^2}{r_{ij}} \tag{21}$$

($r_{ij} = |r_i - r_j|$ — расстояние между протонами i и j). Вычислим по теории возмущений сдвиг E_c уровня энергии стационарного состояния, вызванный кулоновским взаимодействием.

Пусть j — спин невозмущенного состояния. Кратность вырождения такого состояния равна $(2j+1)$ и имеется $(2j+1)$ ортонормированных невозмущенных векторов Φ_μ^j, соответствующих различным значениям μ компоненты J_z полного момента импульса.

Несмотря на это вырождение, мы можем использовать развитую выше теорию возмущений. Действительно, возмущение V, как и H_0, инвариантно относительно вращений, и можно рассматривать задачу на собственные значения независимо в каждом из подпространств $\mathscr{E}(j\mu)$ векторов состояния с заданным моментом $(j\mu)$. Основное состояние в таком подпространстве не вырождено, и поправка первого порядка к энергии вычисляется по формуле (12)

$$E_c \approx \langle \Phi_\mu^j | V | \Phi_\mu^j \rangle. \tag{22}$$

Видно, что поправка не зависит от μ: возмущение не устраняет вырождения. Это верно для всех порядков теории возмущений. Поскольку H, так же как и H_0, инвариантен относительно вращений, то его собственные значения имеют ту же кратность вырождения, что и собственные значения H_0.

Волновая функция состояния Φ_μ^j зависит от координат и внутренних спинов Z протонов и $N = \mathscr{N} - Z$ нейтронов. Так как она антисимметрична по переменным, которые описывают протоны, то $\frac{1}{2}Z(Z-1)$ слагаемых в V дают одинаковый вклад и $E_c = \frac{1}{2}Z(Z-1)\varepsilon$, где

$$\varepsilon = \langle \Phi_\mu^j | (e^2/r_{12}) | \Phi_\mu^j \rangle = \\ = \sum \int |\Phi_\mu^j|^2 (e^2/r_{12})\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2 \ldots d\boldsymbol{r}_Z\, d\boldsymbol{r}_{Z+1} \ldots d\boldsymbol{r}_{\mathscr{N}},$$

суммирование происходит по спиновым переменным всех нуклонов. Обозначим $\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ плотность вероятности найти в данный момент протон 1 в точке $\boldsymbol{r}_1$, а протон 2 — в точке $\boldsymbol{r}_2$:

$$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sum \int |\Phi_\mu^j|^2\, d\boldsymbol{r}_3 \ldots d\boldsymbol{r}_{\mathscr{N}}.$$

Используя это обозначение, получаем

$$\varepsilon = \int (e^2/r_{12})\, \rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2.$$

Для оценки E_c возьмем очень грубую модель, в которой пренебрегают корреляцией между протонами [1]), т. е.

$$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \approx \rho(\boldsymbol{r}_1)\,\rho(\boldsymbol{r}_2) \tag{23}$$

и в которой плотность $\rho(r)$ постоянна внутри сферы радиуса R

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \frac{3}{4\pi R^3} & \text{при } r < R, \\ 0 & \text{при } r > R. \end{cases} \tag{24}$$

Вычисления подобны проделанным в § 4. Подставляя плотности в интеграл I (формула (19)), получаем

$$E_c \approx \frac{3}{5} Z(Z-1)\frac{e^2}{R}. \tag{25}$$

Хотя формула (25) дает относительно грубую оценку величины E_c, ее можно использовать для проверки гипотезы о независимости ядерных сил от заряда (см. § XIV. 15). При этом удобно пользоваться формализмом изотопического спина. Согласно этой гипотезе невозмущенный гамильтониан инвариантен относительно вращений в зарядовом пространстве, и состояния из данного изотопического мультиплета должны иметь одну и ту же энергию связи. Наблюдаемая разность между этими энергиями будет тогда равна разности их кулоновских энергий. Если взять

$$R = 1{,}45 \cdot \mathcal{N}^{\frac{1}{3}} \cdot 10^{-13}\,см,$$

то, используя формулу (25), можно получить разумную оценку для разности энергий основных состояний зеркальных ядер.

§ 6. Поправки высших порядков

Поправки второго порядка, которые следуют из уравнения (7^2), мы получим, переписав уравнения (9) и (11) для случая $n = 2$ и использовав выражения (12) и (14) для поправок первого порядка. Тогда имеем

$$\varepsilon_2 = \langle 0|V|1\rangle = \langle 0|V\frac{Q_0}{a}V|0\rangle, \tag{26}$$

$$|2\rangle = \frac{Q_0}{a}(V-\varepsilon_1)|1\rangle = \left[\frac{Q_0}{a}V\frac{Q_0}{a} - \frac{Q_0}{a^2}V|0\rangle\langle 0|\right]V|0\rangle. \tag{27}$$

Выражения для поправок высших порядков получаются таким же образом. Формулы слишком длинны для того, чтобы выписывать их здесь, но они упрощаются в важном частном

[1]) Таким образом, мы, конечно, завышаем E_c, поскольку принцип Паули требует, чтобы $\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ было значительно меньше при $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$.

случае, когда все поправки низких порядков к невозмущенной энергии исчезают. Тогда, если

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \ldots = \varepsilon_{n-1} = 0, \tag{28}$$

то рекуррентные формулы (9) и (11) дают

$$\varepsilon_n = \langle 0 | V \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^{n-1} | 0\rangle, \tag{29}$$

$$|n\rangle = \frac{Q_0}{a} V |n-1\rangle = \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^2 |n-2\rangle = \ldots = \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^n |0\rangle, \tag{30}$$

и условие (28) можно записать в виде

$$\langle 0 | V | 0\rangle = \langle 0 | V \frac{Q_0}{a} V | 0\rangle = \ldots = \langle 0 | V \left(\frac{Q_0}{a} V\right)^{n-2} | 0\rangle = 0. \tag{28'}$$

В тех случаях, когда это условие не выполняется, редко приходится продолжать вычисления до порядка n. Теория возмущений удобна, только если сходимость достаточно быстрая, так что можно ограничиться вычислением поправок низших порядков. Сложность вычислений быстро растет с увеличением порядка, и вычисления становятся практически невыполнимыми.

Однако общий характер поведения поправок высших порядков представляет интерес при исследовании сходимости разложений по теории возмущений. Так, переписав (26) в терминах матричных элементов V в $\{|E^0\alpha\rangle\}$-представлении, для ε_2 получим выражение

$$\varepsilon_2 = \sum_{E^0 \neq E_a^0} \frac{\sum_\alpha |\langle 0 | V | E^0\alpha\rangle|^2}{E_a^0 - E^0}. \tag{31}$$

Поправки зависят от отношений матричных элементов $\lambda\langle 0 | V | E^0\alpha\rangle$ к разностям энергии $|E_a^0 - E^0|$. Более общим образом можно сказать, что сходимость ряда теории возмущений тем лучше, чем меньше отношения матричных элементов $\lambda\langle E^0\alpha | V | E^{0\prime}\alpha'\rangle$ между двумя собственными состояниями H_0 с энергиями E^0 и $E^{0\prime}$ к разностям $|E_a^0 - E^0|$ и $|E_a^0 - E^{0\prime}|$ между этими энергиями и невозмущенной энергией E_a^0.

Можно получить верхнюю оценку для ε_2, оценивая по абсолютной величине каждое слагаемое в правой части равенства (31). Заменяя каждый знаменатель на $\delta E_{\min}$ — расстояние от E_a^0 до ближайшего уровня, получим

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{1}{\delta E_{\min}} \sum_{E^0 \neq E_a^0} \sum_\alpha \langle 0 | V | E^0\alpha\rangle \langle E^0\alpha | V | 0\rangle,$$

или

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{1}{\delta E_{\min}} \langle 0|VQ_0V|0\rangle.$$

Используя определение Q_0, имеем

$$\langle 0|VQ_0V|0\rangle = \langle 0|V(1-|0\rangle\langle 0|)V|0\rangle = \langle 0|V^2|0\rangle - \langle 0|V|0\rangle^2 = (\Delta V)^2,$$

где $(\Delta V)^2$ — среднее квадратичное отклонение потенциала в состоянии $|0\rangle$. Таким образом,

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{(\Delta V)^2}{\delta E_{\min}}. \tag{32}$$

§ 7. Эффект Штарка для жесткого ротатора

Как правило, вычисление поправки второго порядка ε_2 (31), включающее суммирование бесконечного числа матричных элементов, значительно сложнее вычисления поправки первого порядка, для которой нужно вычислить только один матричный элемент потенциала V. Однако бывают случаи, когда большинство матричных элементов, фигурирующих в (31), равны нулю, и сумма содержит только конечное число слагаемых.

В качестве примера рассмотрим сдвиг уровня энергии жесткого ротатора в эффекте Штарка. Задача такого типа встречается при исследовании поляризации двухатомных молекул в электрическом поле. Жесткий ротатор описывает движение ядер двухатомной молекулы в пределе, когда требуется бесконечно большая энергия для возбуждения колебательного движения. Единственные степени свободы ротатора это угловые переменные (θ, φ), фиксирующие пространственную ориентацию. Обозначим $\boldsymbol{L}$ момент импульса ротатора, а $I = mr_0^2$ — его момент инерции (m — приведенная масса, r_0 — расстояние между ядрами). Гамильтониан ротатора имеет вид

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{L}^2}{2I},$$

а собственными функциями являются сферические функции $Y_l^m(\theta, \varphi)$. Обозначим $|lm\rangle$ вектор, отвечающий Y_l^m. Соответствующая энергия зависит только от l

$$H_0|lm\rangle = E_l^0|lm\rangle, \quad E_l^0 = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1).$$

Если ротатор находится в однородном электрическом поле $\mathscr{E}$, направленном вдоль оси z, то к гамильтониану следует добавить член

$$V = -d\mathscr{E}\cos\theta,$$

где d — электрический дипольный момент ротатора. Вычислим влияние этого члена по теории возмущений.

В $\{|lm\rangle\}$-представлении почти все матричные элементы V равны нулю [1]). Для того чтобы

$$\langle l_1 m_1 | V | l_2 m_2 \rangle \neq 0,$$

необходимо, чтобы

$$m_1 = m_2, \quad l_1 = l_2 \pm 1.$$

При выполнении этих условий матричный элемент можно вычислить по формуле (см. (Б. 90))

$$\langle lm | \cos\theta | l-1\, m\rangle = \langle l-1\, m | \cos\theta | lm\rangle = \left(\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (33)$$

Все невозмущенные уровни энергии, за исключением уровня $l=0$, вырождены. Однако поскольку H_0 и $H \equiv H_0 + V$ коммутируют с L_z, то можно решать задачу на собственные значения для H независимо в каждом из подпространств $\mathscr{E}_m$, отвечающих заданному собственному значению m оператора L_z. В каждом из этих подпространств спектр оператора H_0 не вырожден и можно использовать развитую выше теорию возмущений.

Рассмотрим невозмущенное состояние $|lm\rangle$ в $\mathscr{E}_m$. В силу приведенных выше правил отбора

$$\langle lm | V | lm\rangle = 0,$$

и поправка первого порядка к энергии исчезает. Из тех же соображений поправка второго порядка, вычисляемая по формуле (31), содержит два члена, соответствующих $l \pm 1$:

$$\varepsilon_2^{lm} = \frac{2I\,(d\mathscr{E})^2}{\hbar^2} \sum_{l' \neq l} \frac{|\langle lm | \cos\theta | l'm\rangle|^2}{l(l+1) - l'(l'+1)} =$$

$$= \frac{2I\,(d\mathscr{E})^2}{\hbar^2}\left[\frac{|\langle lm | \cos\theta | l+1\, m\rangle|^2}{l(l+1) - (l+1)(l+2)} + \frac{|\langle lm | \cos\theta | l-1\, m\rangle|^2}{l(l+1) - l(l-1)}\right].$$

Выражение в скобках легко вычислить, используя формулы (33). В результате получим

$$\varepsilon_2^{lm} = \frac{(d\mathscr{E})^2}{E_l^0} \frac{l(l+1) - 3m^2}{2(2l-1)(2l+3)},$$

и спектр энергии с точностью до членов второго порядка равен

$$E_{lm} \approx E_l^0\left[1 + \left(\frac{d\mathscr{E}}{E_l^0}\right)^2 \frac{l(l+1) - 3m^2}{2(2l-1)(2l+3)}\right]. \quad (34)$$

[1]) Эти замечательные свойства связаны с тем, что V есть 0-компонента неприводимого тензорного оператора порядка 1 и его четность равна (—1).

Вырождение снимается лишь частично, поскольку E_{lm} зависит от l и m^2. Состояния, для которых m отличаются только знаком, отвечают одному и тому же уровню. Это остаточное вырождение сохраняется во всех порядках, так как является следствием инвариантности H по отношению к отражениям в плоскостях, проходящих через ось Oz. Мы еще вернемся к этому вопросу в § 13.

Раздел II. ВОЗМУЩЕНИЕ ВЫРОЖДЕННОГО УРОВНЯ

§ 8. Элементарная теория

Предположим, что собственное значение E_a^0 невозмущенного гамильтониана g_a-кратно вырождено. Мы сохраним обозначения § 2 и обозначим $\mathscr{E}_a^0$ подпространство, отвечающее E_a^0, а P_0 — проектор на $\mathscr{E}_a^0$.

Теперь к E_a^0 при $\lambda \to 0$ может стремиться более одного собственного значения H. Обозначим эти собственные значения $E_1, E_2, \ldots, E_n$, кратности их вырождения $g_1, g_2, \ldots, g_n$ и отвечающие им подпространства $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \ldots, \mathscr{E}_n$. Тогда имеем

$$g_1 + g_2 + \ldots + g_n = g_a,$$

и пространство $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 + \ldots + \mathscr{E}_n$ при $\lambda \to 0$ стремится к $\mathscr{E}_a^0$. Если P — проектор на $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 + \ldots + \mathscr{E}_n$, то он является непрерывной функцией λ и

$$P \xrightarrow[\lambda \to 0]{} P_0.$$

Определение собственных значений и собственных функций по теории возмущений сложнее, чем в случае невырожденного невозмущенного собственного значения. В разделе III будет дано строгое решение этой задачи во всех порядках. Здесь же, оставляя в стороне строгость изложения и ограничиваясь низшими порядками, рассмотрим, что дает метод § 2 в применении к этой задаче.

Пусть E — одно из собственных значений $E_1, E_2, \ldots, E_n$, а $|\psi\rangle$ — один из собственных векторов, отвечающих E. В пределе, когда $\lambda \to 0$, $|\psi\rangle$ стремится к некоторому вектору $|0\rangle$, о котором пока можно только сказать, что он принадлежит пространству $\mathscr{E}_a^0$. Предположим, что E и $|\psi\rangle$ можно представить в виде разложений (5) и (6) с условием нормировки (4). Их коэффициенты связаны друг с другом уравнениями (7) и (8) и могут быть определены рекуррентно.

Уравнение (7^0) требует, чтобы вектор $|0\rangle$ принадлежал $\mathscr{E}_a^0$

$$P_0|0\rangle = |0\rangle. \tag{35}$$

Проекция (7^1) на $\mathscr{E}_a^0$ дает

$$P_0(V-\varepsilon_1)|0\rangle=0, \tag{36}$$

а проекция на дополнительное пространство

$$Q_0|1\rangle=\frac{Q_0}{a}V|0\rangle, \tag{37}$$

где мы обозначили

$$Q_0=1-P_0 \tag{38}$$

и определили Q_0/a согласно формуле (10).

Уравнение (36) есть уравнение на собственные значения в подпространстве $\mathscr{E}_a^0$: ε_1 — собственное значение оператора P_0VP_0 в $\mathscr{E}_a^0$, а $|0\rangle$ — соответствующий собственный вектор. Запишем (36) в представлении $|E^0\alpha\rangle$

$$\sum_{a'}\langle E_a^0\alpha|V|E_a^0\alpha'\rangle\langle E_a^0\alpha'|0\rangle=\varepsilon_1\langle E_a^0\alpha|0\rangle,$$

откуда видно, что поправка первого порядка ε_1 получается диагонализацией $g_a\times g_a$ матрицы с матричными элементами

$$V_{\alpha\alpha'}\equiv\langle E_a^0\alpha|V|E_a^0\alpha'\rangle.$$

Возможные значения ε_1 — собственные значения этой матрицы.

Если имеется g_a различных собственных значений, то все они невырождены и возмущение полностью устранило вырождение. Если же различных собственных значений меньше g_a, то некоторые из них будут вырожденными и вырождение устранено лишь частично.

Если поправка первого порядка ε_1 — невырожденное собственное значение, то соответствующий собственный вектор $|0\rangle$ полностью определен в нулевом порядке с точностью до константы уравнениями (7^0) и (7^1). Проекция $Q_0|1\rangle$ поправки первого порядка к $|\psi\rangle$ на дополнение к $\mathscr{E}_a^0$ дается равенством (37), а проекция на $\mathscr{E}_a^0$ остается неопределенной, за исключением условия (4). Если же ε_1, g_1-кратно вырождено, то уравнения (7^0) и (7^1) показывают только, что вектор $|0\rangle$ принадлежит g_1-мерному подпространству; для более точного определения $|0\rangle$ нужно обратиться к высшим порядкам.

Выбрав одно из значений ε_1 и проектируя (7^2) на подпространство, отвечающее ε_1, получаем поправку второго порядка ε_2. Это подпространство, которое мы обозначим $\mathscr{E}_a^{(1)}$, содержится в $\mathscr{E}_a^0$; обозначим соответствующий проектор $P^{(1)}$, а проектор на ортогональное дополнение в $\mathscr{E}_a^0$ через P'

$$P_0=P^{(1)}+P',\quad P^{(1)}+P'+Q_0=1.$$

Тогда имеем

$$P^{(1)}H_0 = P^{(1)}P_0H_0 = E_a^0P^{(1)},$$
$$P^{(1)}V = P^{(1)}V\left(P^{(1)} + P' + Q_0\right) = \varepsilon_1P^{(1)} + P^{(1)}VQ_0.$$

Проекция уравнения (7^2) дает

$$P^{(1)}VQ_0\,|\,1\rangle - \varepsilon_2P^{(1)}\,|\,0\rangle = 0,$$

следовательно, используя (37),

$$P^{(1)}\left[\left(V\frac{Q_0}{a}V\right) - \varepsilon_2\right]|\,0\rangle = 0. \tag{39}$$

Для поправок второго порядка уравнение (39) является аналогом уравнения (36) для поправок первого порядка. Точно так же, как ε_1 было собственным значением P_0VP_0 в $\mathscr{E}_a^0$, ε_2 является собственным значением $P^{(1)}V(Q_0/a)VP^{(1)}$ в $\mathscr{E}_a^{(1)}$, а $|0\rangle$ соответствующий собственный вектор.

Если ε_1 — невырожденное собственное значение ($g_1 = 1$), то $|0\rangle$ определено уравнениями низших порядков, и мы имеем

$$\varepsilon_2 = \langle 0\,|\,V\frac{Q_0}{a}V\,|\,0\rangle,$$

как и в случае невырожденного уровня. Если же $g_1 > 1$, то вычисление ε_2 требует нахождения собственных значений $g_1 \times g_1$ матрицы. Если все они различны, то вырождение полностью устраняется во втором порядке; в противном случае, если необходимо, переходят к высшим порядкам.

В ряде случаев вырождение сохраняется во всех порядках. Мы встречались уже с такими примерами: кулоновская энергия ядер (§ 5) и эффект Штарка для жесткого ротатора (§ 7). Обычно, изучая симметрию H_0 и H, можно предсказать, насколько вероятно устранение вырождения невозмущенного уровня возмущением λV. Систематическое обсуждение этого вопроса приведено в § 13, ниже мы проиллюстрируем метод вычисления поправок первого порядка на ряде примеров, взятых из атомной физики.

§ 9. Атомные уровни без учета спин-орбитального взаимодействия

В главе XIV мы изучали уровни энергии Z-электронных атомов в приближении центрального поля (§ XIV. 12). В этом приближении гамильтониан H заменяется на

$$H_C = \sum_{i=1}^{Z}\left[\frac{p_i^2}{2m} + V_C(r_i)\right].$$

Тем самым, учитывается только усредненное значение электростатического отталкивания электронов. Обозначим V_1 разность между точным кулоновским взаимодействием и потенциалом H_C

$$V_1 = \sum_{i<j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_i \left[V_C(r_i) + \frac{Ze^2}{r_i} \right]. \tag{40}$$

Пренебрегая в H членами, зависящими от спина электрона, запишем его в виде

$$H \approx H_C + V_1, \tag{41}$$

и спектр H можно получить из спектра H_C, рассматривая V_1 как возмущение. Модификации, которые влечет включение зависящих от спина сил, будут рассмотрены в § 10.

Как правило, все собственные значения H_C сильно вырождены. Возмущение V_1, по крайней мере частично, снимает вырождение. Уровни H в окрестности данного собственного значения H_C получаются диагонализацией V_1 в подпространстве, соответствующем этому собственному значению. В частности, основное и первое возбужденное состояния H получаются диагонализацией V_1 в подпространстве $\mathscr{E}_0$, отвечающем низшему собственному значению E_0 оператора H_C.

Свойства симметрии H значительно упрощают задачу диагонализации. Поскольку оператор H (так же как и H_C) не зависит от спинов, он инвариантен не только по отношению к общим поворотам, но и к вращениям орбитальных переменных и спиновых переменных по отдельности, т. е. H коммутирует не только с полным моментом импульса $\boldsymbol{J}$, но и с полным орбитальным моментом $\boldsymbol{L}$ и полным спином $\boldsymbol{S}$ [1]). Поскольку свойства симметрии H_C и H одинаковы, оператор $P_0 V_1 P_0$ будет коммутировать с $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{S}$. Его собственные значения в подпространстве $\mathscr{E}_0$ можно параметризовать собственными значениями операторов $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, L_z и S_z, они будут зависеть только от L и S, а кратность их вырождения будет равна $(2L+1)(2S+1)$.

Обозначим $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ векторы стандартного $\{\boldsymbol{L}^2, L_z, \boldsymbol{S}^2, S_z\}$-базиса в $\mathscr{E}_0$, квантовое число γ параметризует векторы, которые имеют одинаковый орбитальный момент и спин. В таком представлении матрица оператора $P_0 V_1 P_0$ имеет очень простой вид

$$\langle \gamma LSM_L M_S | V_1 | \gamma' L' S' M'_L M'_S \rangle = \delta_{LL'} \delta_{SS'} \delta_{M_L M'_L} \delta_{M_S M'_S} \mathscr{V}^{(LS)}_{\gamma\gamma'}.$$

Для полной диагонализации остается только диагонализовать матрицы $\mathscr{V}^{(LS)}_{\gamma\gamma'}$, отвечающие каждой паре квантовых чисел (LS).

[1]) H инвариантен также относительно перестановок орбитальных переменных, но в силу теоремы § Г. 18 и принципа Паули это эквивалентно инвариантности относительно вращений спинов.

Рассмотрим, например, атом углерода. Конфигурация основного состояния равна $1s^2 2s^2 2p^2$, т. е. — две замкнутых оболочки $1s$ и $2s$, и незамкнутая оболочка $2p$ с двумя электронами. Эта конфигурация имеет вырождение $C_6^2 = 15$. Для того, чтобы найти возможные значения пар (LS) и их вырождение, т. е. число серий из $(2L+1)(2S+1)$ векторов, можно рассматривать только два $2p$ электрона, опуская замкнутые оболочки (задача 3).

Если не учитывать принцип Паули, то из двух $2p$ электронов можно образовать следующие различные спектральные термы:

$$^3S \quad ^3P \quad ^3D \quad ^1S \quad ^1P \quad ^1D.$$

Поскольку триплетное и синглетное спиновые состояния при перестановке спинов симметрично и антисимметрично соответственно, а состояния S и D симметричны, а P антисимметрично при перестановке орбитальных переменных, то из приведенных спектральных термов принципу Паули удовлетворяют

$$^3P \quad ^1S \quad ^1D,$$

всего $9+1+5=15$ линейно независимых антисимметричных состояний, как и утверждалось выше. В $\{LSM_LM_S\}$-базисе (в данном случае квантовое число γ излишне) возмущение V_1 диагонально и имеет три различных собственных значения $\mathscr{V}(^3P)$, $\mathscr{V}(^1S)$ и $\mathscr{V}(^1D)$, которые 9-, 1- и 5-кратно вырождены, соответственно. Эти значения не сложно вычислить, если известны волновые функции отдельных состояний. Вычисление показывает, что уровень ^3P расположен значительно ниже двух других (рис. 8)[1]).

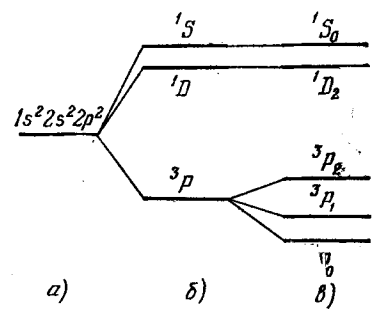


Рис. 8. Энергетические уровни основного состояния атома углерода: *а*) в приближении центрального поля ($V_1 = V_2 = 0$); *б*) в пренебрежении спин-орбитальной связью ($V_2 = 0$); *в*) при учете спин-орбитальной связи.

---

[1]) Как правило, уровни данной конфигурации располагаются в порядке убывания полного спина (*правило Хунда*). Поскольку второе слагаемое в (40) дает один и тот же вклад во все уровни, порядок следования уровней зависит только от величины энергии отталкивания $\sum e^2/|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|$. Это слагаемое убывает с увеличением расстояния между электронами и, следовательно, с «возрастанием антисимметричности» орбитальной части волновой функции. Спиновая часть волновой функции становится «симметричнее» с ростом S (§ Г. 18) и, следовательно, орбитальная часть становится «более антисимметричной» с ростом S.

§ 10. Спин-орбитальное взаимодействие. *LS*- и *jj*-связь

Выражение (41) равно H только приближенно. Оператор H содержит члены, зависящие от спина, которые мы обозначим V_2:

$$H = H_C + V_1 + V_2. \tag{42}$$

В первом приближении каждый электрон движется независимо от других электронов в потенциале $V_C(r)$, и его спин взаимодействует с его орбитальным моментом по закону (XIII. 95). Следовательно, с хорошим приближением имеем

$$V_2 \approx \sum_{i=1}^{Z} (\boldsymbol{l}_i \cdot \boldsymbol{s}_i)\, g(r_i), \tag{43}$$

где

$$g(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{dV_c}{dr}. \tag{44}$$

Для того чтобы корректно учесть этот эффект, необходимо в рассуждениях предыдущего параграфа заменить V на $V_1 + V_2$. Однако сумма $V_1 + V_2$ обладает меньшей симметрией, чем V_1: $V_1 + V_2$ коммутирует только с $\boldsymbol{J}$ и не коммутирует с $\boldsymbol{L}$ или $\boldsymbol{S}$. Задача диагонализации возмущения в подпространстве, отвечающем невозмущенному собственному значению после учета спин-орбитального взаимодействия становится значительно сложнее. Эта задача несколько упрощается только в случае, когда один из членов, V_1 или V_2, много меньше другого.

Если $V_1 \gg V_2$, то в первом приближении можно пренебречь V_2. Каждая конфигурация будет давать серию уровней, каждый из которых отвечает определенной паре (LS) и имеет кратность вырождения $(2L+1)(2S+1)$ (ср. § 9). Соответствующие собственные векторы являются линейными комбинациями определителей Слетера, построенных из одночастичных состояний конфигурации. Это собственные векторы для $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, L_z, S_z. Оператор V_2 рассматривается тогда как малое возмущение в подпространстве, отвечающем каждому из этих уровней. Каждому возможному значению $J\,(J = L+S,\ L+S-1,\ \ldots,\ |L-S|)$ соответствует собственное значение V_2 с кратностью вырождения $(2J+1)$. Соответствующие собственные векторы $|\gamma LSJM\rangle$ являются собственными для $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. Такой метод построения собственных векторов полного момента импульса из определителей Слетера фиксированной конфигурации отвечает *связи Рассела — Саундерса* или *LS*-связи.

Если $V_2 \gg V_1$, то в первом приближении можно пренебречь V_1. Тогда гамильтониан равен $H_C + V_2$, что соответствует независимым частицам, движущимся в потенциале $V_C + (\boldsymbol{ls})g(r)$. Обозначим $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$ полный момент импульса каждой частицы. Наличие спин-орбитального взаимодействия $(\boldsymbol{ls})g(r)$ частично

устраняет вырождение одночастичных состояний с орбитальным моментом, отличным от нуля, давая два уровня $j=l\pm\frac{1}{2}$. Соответствующие собственные векторы можно параметризовать квантовыми числами $(nljm)$. Во всем остальном рассмотрение H_C+V_2 подобно рассмотрению H_C (§ XIV. 12); каждая конфигурация H_C приводит к нескольким конфигурациям H_C+V_2. Как только последние определены, V_1 можно рассматривать для каждой из них как возмущение. Каждому собственному значению J отвечает одно или несколько собственных значений с кратностью вырождения $(2J+1)$. Соответствующие собственные векторы являются собственными для $\boldsymbol{j}_i^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. Такой метод построения собственных векторов полного момента из определителей Слетера конфигурации основного состояния называется *jj-связью*.

Приведем схему этих методов

LS-связь		*jj*-связь	
(V_1)	$\boldsymbol{L}=\sum_i \boldsymbol{l}_i,\quad \boldsymbol{S}=\sum_i \boldsymbol{s}_i,$	(V_2)	$\boldsymbol{j}_i=\boldsymbol{l}_i+\boldsymbol{s}_i,$
(V_2)	$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S},$	(V_1)	$\boldsymbol{J}=\sum_i \boldsymbol{j}_i.$

Относительное значение V_2 быстро растет с числом Z [1]). Для легких и промежуточных атомов $V_1 \gg V_2$ и *LS*-связь дает хорошее приближение; для тяжелых атомов (начиная, скажем, с Pb) V_1 и V_2 становятся величинами одного порядка и структура уровней конфигурации основного состояния является промежуточной между структурами, которые получаются при *LS*- и *jj*-связях.

§ 11. Атом с *LS*-связью. Расщепление за счет спин-орбитального взаимодействия

Рассмотрим влияние спин-орбитального взаимодействия в случае *LS*-связи ($V_1 \gg V_2$), когда V_2 можно считать возмущением гамильтониана H_C+V_1.

Спектр невозмущенного гамильтониана был описан в § 9. Каждый уровень отвечает определенному значению L и S и

[1]) V_1 представляет собой флуктуационный член, влияние которого на энергию каждого электрона растет приблизительно как $\sqrt{Z}$. Энергия спин-орбитального взаимодействия каждого электрона растет приблизительно как Z^2. Ее можно оценить, используя модель Томаса — Ферми; взаимодействие пропорционально среднему значению $(1/r)\,(dV_C/dr)$, что приближенно равно (обозначения § XIV. 13)

$$\frac{1}{r}\frac{dV_C}{dr}\approx\frac{Z^2e^2}{b^3}\frac{d}{dx}\left(\frac{\chi}{x}\right).$$

кратность его вырождения равна $(2L+1)(2S+1)$; подпространство соответствующих собственных векторов натянуто на множество векторов с определенными значениями орбитального момента и спина; обозначим их $|\alpha LSM_LM_S\rangle$. Квантовое число α указывает конфигурацию H_C, к которой принадлежит данный уровень, и служит для того, чтобы различать уровни одной и той же конфигурации, имеющие одинаковые значения L и S.

Энергия возмущения получится, если диагонализовать V_2 в подпространстве $\mathscr{E}(\alpha LS)$, отвечающем каждому из невозмущенных уровней. Покажем, что в каждом из подпространств $\mathscr{E}(\alpha LS)$ матричные элементы V_2 те же, что и у оператора $A(\boldsymbol{LS})$, где A — константа, характеризующая невозмущенный уровень (αLS)

$$\langle \alpha LSM_LM_S | V_2 | \alpha LSM'_LM'_S\rangle = A\langle \alpha LSM_LM_S | (\boldsymbol{LS}) | \alpha LSM'_LM'_S\rangle. \quad (45)$$

Доказательство. Поскольку базисные векторы антисимметричны, вклады в матричный элемент Z членов в V_2 (ур. (43)) равны. Следовательно, достаточно рассмотреть только один из них, например, $(l_1s_1)g(r_1)$; индекс 1 не существен и далее мы его опускаем. Взяв произвольную компоненту l_m оператора $\boldsymbol{l}$ и произвольную компоненту s_μ оператора $\boldsymbol{s}$, можно построить оператор $g(r)\,l_m s_\mu$, который является компонентой векторного оператора, неприводимого по отношению к вращениям орбитальных переменных, и компонентой векторного оператора, неприводимого по отношению к вращениям спиновых переменных. Таким же свойством обладает и оператор L_mS_μ. Используя теорему Вигнера — Эккарта, несложно получить (см. задачу XIII. 19)

$$\langle \alpha LSM_LM_S | gl_ms_\mu | \alpha LSM'_LM'_S\rangle = a\langle \alpha LSM_LM_S | L_mS_\mu | \alpha LSM'_LM'_S\rangle,$$

где a — не зависящая от магнитных квантовых чисел M_L, M'_L, M_S, M'_S, m, μ константа. Следовательно,

$$\langle \alpha LSM_LM_S | g(r)(\boldsymbol{ls}) | \alpha LSM'_LM'_S\rangle = a\langle \alpha LSM_LM_S | (\boldsymbol{LS}) | \alpha LSM'_LM'_S\rangle$$

и соотношение (45) получается, если каждый член умножить на Z и положить $A = Za$.

Оператор V_2 в подпространстве $\mathscr{E}(\alpha LS)$ не диагонален в представлении $\{\alpha LSM_LM_S\}$, но поскольку он инвариантен относительно вращений, он диагонален в представлении $\{\alpha LSJM\}$, базисные векторы которого являются собственными для операторов $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. Соотношение (45) позволяет определить его собственные значения. Действительно, поскольку

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{S}^2 + 2\boldsymbol{LS}$$

имеем

$$\langle \alpha LSJM | V_2 | \alpha LSJM\rangle = \frac{1}{2} A\langle \alpha LSJM | (\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2) | \alpha LSJM\rangle =$$

$$= \frac{1}{2} A\hbar^2 [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \quad (46)$$

Таким образом, невозмущенный уровень (αLS) расщепляется на столько уровней, сколько имеется возможных значений $J (J = L + S, \ldots, |L - S|)$. Кратность их вырождения равна $(2J + 1)$, а энергия возмущения дается формулой (46).

На рис. 8 приведена схема уровней конфигурации основного состояния атома углерода с LS-связью. Спин-орбитальное взаимодействие влияет лишь на состояние ^3P; оно расщепляется на три: $^3P_0$, $^3P_1$ и $^3P_2$. Так как в данном случае $A > 0$, уровни расположены в порядке возрастания J и низшим является уровень $^3P_0$.

§ 12. Эффект Зеемана и эффект Пашена — Бака

В последних трех параграфах мы изучали структуру атомных уровней без внешних полей. Рассмотрим теперь атом, помещенный в постоянное магнитное поле $\mathcal{H}$. В этом случае гамильтониан атома получается из гамильтониана H_0 без внешнего поля прибавлением члена (ср. ур. (XIII. 96))

$$W = -\frac{e}{2mc}[\mathcal{H}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S})] \tag{47}$$

(а также «диамагнитного» члена, пропорционального $\mathcal{H}^2$, которым мы пренебрегаем).

Эффект Зеемана. Для достаточного малых $\mathcal{H}$ можно рассматривать W как возмущение. Поскольку гамильтониан H_0 инвариантен по отношению к вращениям, каждый уровень H_0 отвечает определенному значению J полного момента импульса. Будем предполагать, что $J \neq 0$ [1]), тогда кратность вырождения уровня равна $(2J + 1)$. Возмущение W снимает это вырождение.

Пусть E_0 — один из невозмущенных уровней, J — его момент импульса, а $|E_0JM\rangle$ — собственные векторы $\boldsymbol{J}^2$ и J_z, на которые натянуто подпространство, отвечающее уровню E_0. Сдвиги данного уровня, вызванные магнитным полем, равны собственным значениям матрицы

$$\langle E_0JM | W | E_0JM' \rangle.$$

Если выбрать ось z параллельно $\mathcal{H}$, то эта матрица будет диагональна, поскольку W будет коммутировать с J_z.

Кроме того, в силу теоремы Вигнера — Эккарта матричные элементы векторных операторов $\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}$ и $\boldsymbol{J}$ в подпространстве уровня E_0 пропорциональны друг другу:

$$\langle E_0JM | (\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) | E_0JM' \rangle = g\langle E_0JM | \boldsymbol{J} | E_0JM' \rangle. \tag{48}$$

[1]) Если $J = 0$ (диамагнитный атом), то сдвиг уровня исчезает в первом порядке по $\mathcal{H}$. Вычисляя сдвиг во втором порядке по $\mathcal{H}$, следует учесть вклад «диамагнитного» члена.

Коэффициент пропорциональности g (множитель Ланде) равен отношению приведенных матричных элементов этих операторов, он характеризует рассматриваемый уровень E_0. В частности,

$$\langle E_0 JM | (L_z + 2S_z) | E_0 JM' \rangle = gM\hbar\delta_{MM'}.$$

Для выбранной ориентации осей

$$W = -\frac{e\mathcal{H}}{2mc}(L_z + 2S_z),$$

и, обозначая μ_B магнетон Бора (ур. (XIII. 74)), получаем

$$\langle E_0 JM | W | E_0 JM' \rangle = -Mg\mu_B\mathcal{H}\delta_{MM'}.$$

Таким образом, возмущение полностью устраняет вырождение и $(2J+1)$ уровней определяются по *формуле Зеемана*

$$E = E_0 - Mg\mu_B\mathcal{H} \quad (M = -J, -J+1, \ldots, +J). \tag{49}$$

Вычисление множителя Ланде в случае LS-связи. Множитель Ланде g (фактор Ланде) определен уравнением (48). Предположим, что для рассматриваемого атома верна схема LS-связи. Тогда, следуя обозначениям § 11, уровни атома при нулевом внешнем поле будут характеризоваться квантовыми числами αLSJ.

Для определения g вычислим двумя различными способами среднее значение

$$\langle \boldsymbol{J}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) \rangle \equiv \langle \alpha LSJM | (\boldsymbol{J}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S})) | \alpha LSJM \rangle.$$

(а) Используя тождество

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) = \boldsymbol{J}^2 + \boldsymbol{S}^2 + \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2),$$

имеем

$$\langle \boldsymbol{J}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) \rangle = \tfrac{1}{2}[3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]\hbar^2.$$

(б) Непосредственно перемножая матрицы в $\{\alpha LSJM\}$-представлении и используя соотношение (48), получаем (ср. задачу XIII. 19)

$$\langle \boldsymbol{J}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) \rangle = \sum_{i=xyz} \sum_{M'} \langle \alpha LSJM | J_i | \alpha LSJM' \rangle \times$$

$$\times \langle \alpha LSJM' | (L_i + 2S_i) | \alpha LSJM \rangle =$$

$$= g\langle \alpha LSJM | \boldsymbol{J}^2 | \alpha LSJM \rangle = gJ(J+1)\hbar^2.$$

Сравнивая эти два результата, находим

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \tag{50}$$

Эффект Пашена — Бака. Приведенная теория эффекта Зеемана оправдана, только если расщепление уровней возмущением W мало по сравнению с расстоянием между невозмущенными уровнями. В случае LS-связи это предполагает, что W мало по сравнению со спин-орбитальным взаимодействием V_2 или, более точно (см. ур. (46) и (49)), что

$$|g|\mu_B\mathcal{H} \ll A\hbar^2.$$

Предположим, что имеет место обратная ситуация и магнитное поле так велико, что

$$A\hbar^2 \ll \mu_B\mathcal{H}.$$

В этом случае спин-орбитальное взаимодействие пренебрежимо мало по сравнению с магнитным и последнее можно рассматривать как возмущение уровней гамильтониана

$$H_C + V_1.$$

В обозначениях § 11 каждый из этих невозмущенных уровней параметризуется квантовыми числами (αLS) и имеет кратность вырождения $(2S+1)(2L+1)$. Возмущение устраняет вырождение лишь частично. Этот эффект называется эффектом Пашена — Бака. Смещение относительно невозмущенного уровня $E_{\alpha LS}$ получают, диагонализуя W в соответствующем подпространстве. Поскольку W коммутирует с L_z и S_z, матрица возмущения диагональна в $\{\alpha LSM_LM_S\}$-представлении

$$\langle \alpha LSM_LM_S|W|\alpha LSM'_LM'_S\rangle = -\mu_B\mathcal{H}(M_L+2M_S)\delta_{M_LM'_L}\delta_{M_SM'_S}.$$

Следовательно, сдвиги уровней определяются формулой

$$E = E_{\alpha LS} - \mu_B\mathcal{H}(M_L+2M_S)$$
$$(M_L = -L, \ldots, +L; \quad M_S = -S, \ldots, +S)$$

Если $L \neq 0$ и $S \neq 0$, то некоторые из полученных уровней остаются еще вырожденными. Введение малого спин-орбитального взаимодействия по крайней мере частично устраняет эти остаточные вырождения.

§ 13. Симметрия H и устранение вырождения [1])

Предыдущие примеры (§§ 5, 7, 9, 10, 11, 12) показывают, насколько важно учитывать симметрию при вычислении сдвигов вырожденных уровней по теории возмущений. Существование вырожденных собственных значений можно почти всегда свя-

[1]) Этот параграф, единственный в данной главе, в котором используются результаты главы XV и ряд понятий из теории групп, может быть опущен при первом чтении.

зать с симметрией гамильтониана. Если известны группы инвариантности H_0 и H, то можно предсказать изменение вырождения уровня E_a^0 под действием возмущения и значительно упростить вычисление возмущенных уровней.

Во всех приведенных примерах невозмущенный гамильтониан H_0 был инвариантен по отношению к некоторой группе G_0, а возмущение λV было инвариантно по отношению к некоторой подгруппе G группы G_0. Так, в случае эффекта Штарка для жесткого ротатора (§ 7) G_0 была группой вращений и отражений, а G — группой отражений по отношению к плоскостям, проходящим через ось z (см. § XV. 14).

Воспользуемся обозначениями § XV. 11. Используя операторы G, можно построить наблюдаемые J и M с собственными значениями j и μ соответственно. Каждому значению j отвечает определенное неприводимое представление группы. Обозначим d_j размерность этого представления. Для данного j существует d_j возможных значений μ, параметризующих d_j базисных векторов данного представления. Каждой паре $(j\mu)$ отвечает некоторое подпространство $\mathscr{E}(j\mu)$ пространства векторов состояния $\mathscr{E}$. Так как H и H_0 инвариантны по отношению к преобразованиям из G и, следовательно, коммутируют с J и M, то задачу на собственные значения можно решать отдельно в каждом из подпространств $\mathscr{E}(j\mu)$. Мы получим одинаковые спектры и вырождение в d_j подпространствах, отвечающих данному значению j.

Допустим, что E_a^0 есть собственное значение H_0 в $\mathscr{E}(j\mu)$ с кратностью вырождения p_j. Тогда имеем

$$g_a = \sum_j p_j d_j. \tag{51}$$

В подпространстве $\mathscr{E}(j\mu)$ введение возмущения может с большей или меньшей полнотой устранить вырождение невозмущенной энергии (считаем $p_j > 1$). Если H инвариантен только относительно преобразований из группы G, то рассматриваемое вырождение, вообще говоря, устраняется полностью и мы получаем p_j различных уровней. *Следовательно, во всем пространстве $\mathscr{E}$ введение возмущения расщепляет невозмущенный уровень самое большее на $\sum_j p_j$ различных уровней, каждый из которых отвечает определенному значению j и имеет кратность вырождения d_j, если в $\mathscr{E}(j\mu)$ вырождение устранено полностью, в противном случае вырождение уровня кратно d_j.*

Доказательство этих результатов использует только тот факт, что группой симметрии гамильтониана H является G, и H есть непрерывная функция λ, стремящаяся к H_0 при $\lambda \to 0$. *Эти результаты точны во всех порядках теории возмущений.*

Если подпространство $\mathscr{E}_a^0$ неприводимо по отношению к группе G, то сумма (51) будет состоять только из одного слагаемого [1]) и вырождение уровня не может быть устранено ни в каком порядке. Так происходит, когда H_0 инвариантен относительно тех же преобразований, что и $H(G_0 = G)$. Мы встречались с такой ситуацией, когда вычисляли кулоновскую энергию ядер (§ 5).

В примере § 7 G представляет собой подгруппу G_0. Размерность подпространства $\mathscr{E}_l^0$, отвечающего собственному значению E_l^0, равна $(2l+1)$. Оно неприводимо по отношению к G_0 и приводимо (если $l \neq 0$) по отношению к G. В данном случае (см. § XV. 14) оператором J является l_z^2 с собственными значениями m^2, которые можно характеризовать квантовым числом $|m|$ ($|m| = 0, 1, \ldots$); размерность соответствующего неприводимого подпространства равна

$$d_{|m|} = \begin{cases} 2, & \text{если } |m| \neq 0 \\ 1, & \text{если } |m| = 0. \end{cases}$$

В этом случае соотношение (51) принимает вид

$$g_l \equiv 2l+1 = \sum_{|m|=0}^{l} d_{|m|}.$$

Таким образом, возмущение расщепляет уровень E_l^0 на $l+1$ различных уровней, один из которых не вырожден при $|m| = 0$, а остальные двукратно вырождены. Именно это было установлено в § 7. Следует подчеркнуть, что такое использование симметрии позволяет только оценить сверху возможность снятия вырождения. Происходит ли это в действительности, можно сказать только после вычисления по теории возмущений до достаточно больших порядков. Так, в примере из § 7 пришлось вычислять до второго порядка включительно.

§ 14. Квазивырождение

Если два уровня E_a^0 и E_b^0 расположены настолько близко друг к другу, что поправки к ним за счет возмущения V больше чем $|E_a^0 - E_b^0|$, то пользоваться развитыми ранее методами нельзя. Однако и в этом «квазивырожденном» случае можно

---

[1]) Подпространство $\mathscr{E}_a^0$ инвариантно по отношению к преобразованиям из G и определяет некоторое представление размерности g_a этой группы, которое мы обозначим G_a. Его разложение на неприводимые части согласно (51) имеет вид $G_a \approx \sum_l p_l G^{(l)}$.

использовать теорию возмущений, если подходящим образом изменить определение невозмущенного гамильтониана и возмущения.

Обозначим P_i^0 проектор на подпространство, отвечающее собственному значению E_i^0 оператора H_0. Тогда имеем

$$H_0 = \sum_i E_i^0 P_i^0.$$

Модификация гамильтониана состоит в замене слагаемых $E_a^0 P_a^0$ и $E_b^0 P_b^0$ в этой сумме на $E_\alpha^0 (P_a^0 + P_b^0)$, где E_α^0 — величина, промежуточная между E_a^0 и E_b^0. Так, получаем новый невозмущенный гамильтониан, у которого собственное значение E_α^0 имеет кратность вырождения $g_a + g_b$. Далее следует вычислить поправки к E_α^0 за счет возмущения

$$V + (E_a^0 - E_\alpha^0) P_a^0 + (E_b^0 - E_\alpha^0) P_b^0.$$

Такой метод был использован при рассмотрении эффекта Пашена — Бака (§ 12). Поле $\mathscr{H}$ было достаточно сильным, так что сдвиги уровня данного LS-терма не были малыми по сравнению с расстоянием между уровнями. Тогда мы взяли в качестве невозмущенного гамильтониан $H_C + V_1$ вместо $H_C + V_1 + V_2$, что привело к замене группы уровней $E_{\alpha LSJ}$ ($J = |L - S|, \ldots, L + S$) на один уровень $E_{\alpha LS}$. Далее, следовало бы вычислить поправки к $E_{\alpha LS}$, вызванные возмущением $V_2 + W$. Для чистого эффекта Пашена — Бака поле $\mathscr{H}$ настолько сильное, что в первом приближении влиянием V_2 можно пренебречь ($V_2 \ll W$), это и было сделано в § 12. Если V_2 и W — величины одного порядка, то такое приближение не применимо и вычисления становятся значительно сложнее (задачи 7 и 8).

Раздел III. ЯВНЫЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ РАЗЛОЖЕНИЙ ПО ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ВО ВСЕХ ПОРЯДКАХ [1]

§ 15. Гамильтониан H и его резольвента [2] $G(z)$

В этом разделе мы изложим кратко подход, дающий явный вид членов любого порядка разложения по теории возмущений. В подходе, предложенном Като [3], используется разложение

[1] Этот раздел при первом чтении можно опустить.

[2] Ряд авторов использует термин «функция Грина» вместо «резольвента».

[3] *T. Kato.* Prog. Theor. Phys. 4, 154 (1949). Като интересовался в основном условиями сходимости теории возмущений, и его подход особенно удобен при обсуждении этого вопроса. В большинстве встречающихся случаев разложение по теории возмущений является асимптотическим. Мы не будем в данном разделе касаться математических аспектов работы Като.

резольвенты $G(z)$ гамильтониана H в ряд по степеням возмущения. В этом параграфе мы определим $G(z)$ и опишем некоторые ее свойства.

По определению, если оператор H — наблюдаемая, то его *резольвентой* называется функция

$$G(z) \equiv \frac{1}{z - H} \tag{52}$$

комплексной переменной z [1]).

На рис. 9 изображена комплексная плоскость z и на вещественной оси отмечен спектр H; спектр обычно состоит из

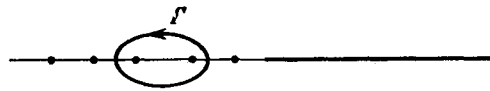


Рис. 9. Комплексная плоскость z, определение контура Γ. Спектр H выделен на вещественной оси жирными линией и точками.

дискретной части и непрерывной части, последняя располагается справа от дискретной части и тянется вплоть до бесконечности. Резольвента $G(z)$ является аналитической функцией z, а ее особенности образуют спектр H.

Предположим для простоты, что спектр оператора H чисто дискретный. Собственные значения обозначим E_0, E_1, ..., ..., E_i, ..., а проектор на отвечающее E_i подпространство — P_i

$$HP_i = E_iP_i \tag{53}$$

Соотношения ортогональности и полноты имеют вид

$$P_iP_j = \delta_{ij}P_i, \tag{54}$$

$$\sum_i P_i = 1. \tag{55}$$

---

[1]) По определению, оператор Q в гильбертовом пространстве называется ограниченным, если существует константа M такая, что для любого $|u\rangle$

$$\frac{\langle u | Q^+Q | u\rangle}{\langle u | u\rangle} \leqslant M^2.$$

Наименьшее значение M называется нормой оператора и обозначается $\|Q\|$. Строго говоря, различные операции алгебры и анализа, в частности, понятия сходимости рядов, дифференцирования и т. д., могут быть перенесены без ограничений только на ограниченные операторы в гильбертовом пространстве (см. *M. H. Stone* Linear transformation in Hilbert space, № 4, Amer. Math. Soc., 1932).

С математической точки зрения $G(z)$ представляет большой интерес, поскольку является ограниченным оператором на всей комплексной плоскости z, за исключением собственных значений оператора H, и аналитической функцией z, особенности которой образуют спектр H. Если обозначить $\Delta(z)$ расстояние от точки z до ближайшего собственного значения H, то $\|G(z)\| = 1/\Delta(z)$.

Из определения (52) имеем

$$G(z)\,P_i = \frac{P_i}{z - E_i}$$

и, следовательно,

$$G(z) = \sum_i \frac{P_i}{z - E_i}. \tag{56}$$

Каждому дискретному собственному значению E_i оператора H отвечает простой полюс $G(z)$, вычет в котором равен проектору P_i. Другими словами

$$P_i = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_i} G(z)\,dz, \tag{57}$$

где Γ_i — замкнутый контур в комплексной плоскости, окружающий E_i, а все остальные сингулярности $G(z)$ лежат вне его. В более общем случае, если Γ — замкнутый контур, не проходящий ни через одно из собственных значений H (рис. 9), а P_Γ — сумма проекторов P_i, соответствующих собственным значениям внутри этого контура, то

$$P_\Gamma = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} G(z)\,dz. \tag{58}$$

Умножая уравнение (58) на H и учитывая тождество

$$(z - H)\,G \equiv G\,(z - H) \equiv 1,$$

получаем важную формулу

$$HP_\Gamma = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} zG(z)\,dz. \tag{59}$$

§ 16. Разложение $G(z)$, P и HP в ряд по степеням λV

Рассмотрим теперь собственно задачу теории возмущений. Резольвенты операторов H и H_0 обозначим соответственно

$$G \equiv \frac{1}{z - H_0 - \lambda V}, \quad G_0 \equiv \frac{1}{z - H_0}. \tag{60}$$

Заметим, что

$$\frac{1}{z - H_0 - \lambda V} = \frac{1}{z - H_0}\,[(z - H_0 - \lambda V) + \lambda V]\,\frac{1}{z - H_0 - \lambda V} =$$

$$= \frac{1}{z - H_0} + \frac{1}{z - H_0}\,\lambda V\,\frac{1}{z - H_0 - \lambda V}$$

и, следовательно, G является решением интегрального уравнения

$$G = G_0(1 + \lambda VG). \tag{61}$$

Интегрируя это уравнение, получаем G в виде разложения по степеням возмущения [1])

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n G_0 (VG_0)^n. \tag{62}$$

Используя обозначения § 8, найдем разложение P по степеням возмущения. Для достаточно малых λ в комплексной плоскости z существует замкнутый контур, содержащий внутри себя невозмущенное собственное значение E_a^0 и собственное значение оператора H, которое стремится к E_a^0 при $\lambda \to 0$, и не содержащий каких-либо других собственных значений H и H_0. Обозначим такой контур Γ_a. Согласно уравнению (58) имеем

$$P = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_a} G(z)\, dz.$$

Подставляя вместо G разложение (62) и меняя порядок суммирования и интегрирования, получаем разложение P в виде ряда по степеням λ

$$P = P_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n A^{(n)}, \tag{63}$$

где

$$A^{(n)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_a} G_0 (VG_0)^n\, dz. \tag{64}$$

Единственной особенностью функции $G_0(VG_0)^n$ внутри контура Γ_a является полюс в точке E_a^0 порядка $n+1$ и согласно уравнению (64) $A^{(n)}$ — вычет в этом полюсе.

Для вычисления вычета используем разложение G_0 в ряд Лорана в окрестности точки E_a^0. Коэффициенты разложения легко вычисляются из выражения (56) для резольвенты. Получаем

$$G_0 = \frac{P_0}{z - E_a^0} + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} (z - E_a^0)^{k-1} \frac{Q_0}{a^k}.$$

---

[1]) Радиус сходимости для этого разложения равен $\|\lambda VG_0\|$. Следовательно, ряд сходится абсолютно при $\|\lambda V\| < \Delta_0(z)$, где $\Delta_0(z)$ — расстояние от z до ближайшего собственного значения H_0.

Следуя Като, введем обозначение $S^k (k \geqslant 0)$:

$$S^k = \begin{cases} -P_0, & \text{если } k = 0, \\ \dfrac{Q_0}{a^k}, & \text{если } k \geqslant 1. \end{cases} \tag{65}$$

Тогда полученное разложение можно переписать в виде

$$G_0 = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k-1} (z - E_a^0)^{k-1} S^k. \tag{66}$$

Коэффициент при $(z - E_a^0)^{-1}$ в разложении $G_0 (VG_0)^n$ в ряд Лорана равен $A^{(n)}$. Принимая во внимание разложение (66), находим

$$A^{(n)} = -\sum_{(n)} S^{k_1} V S^{k_2} V \ldots V S^{k_{n+1}}, \tag{67}$$

где $\sum_{(n)}$ означает суммирование по всем наборам неотрицательных целых чисел $k_1, k_2, \ldots, k_{n+1}$ таких, что

$$k_1 + k_2 + \ldots + k_{n+1} = p. \tag{68}$$

Приведем несколько первых членов разложения P:

$$P = P_0 + \lambda \left(P_0 V \frac{Q_0}{a} + \frac{Q_0}{a} V P_0 \right) + \lambda^2 \left(P_0 V \frac{Q_0}{a} V \frac{Q_0}{a} + \right.$$
$$+ \frac{Q_0}{a} V P_0 V \frac{Q_0}{a} + \frac{Q_0}{a} V \frac{Q_0}{a} V P_0 - P_0 V P_0 V \frac{Q_0}{a^2} - P_0 V \frac{Q_0}{a^2} V P_0 -$$
$$\left. - \frac{Q_0}{a^2} V P_0 V P_0 \right) + \ldots. \tag{69}$$

Исходя из уравнения (59) и действуя таким же образом, получаем разложение HP. Находим

$$(H - E_a^0) P = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n B^{(n)}, \tag{70}$$

где

$$B^{(n)} = \sum_{(n-1)} S^{k_1} V S^{k_2} V \ldots V S^{k_{n+1}}. \tag{71}$$

Итак,

$$(H - E_a^0) P =$$
$$= \lambda P_0 V P_0 + \lambda^2 \left(P_0 V P_0 V \frac{Q_0}{a} + P_0 V \frac{Q_0}{a} V P_0 + \frac{Q_0}{a} V P_0 V P_0 \right) + \ldots. \tag{72}$$

§ 17. Вычисление собственных значений и собственных функций

Искомые собственные значения и собственные векторы H совпадают с собственными значениями и собственными векторами оператора HP в пространстве $\mathscr{E}$, для которого P — проектор. Поскольку вид P и HP известен, задача свелась к диагонализации матрицы в пространстве размерности g_a.

Невырожденный случай: $g_a = 1$. В этом случае собственный вектор H равен $P|0\rangle$. Разложение для квадрата его нормы $\langle 0|P|0\rangle$ легко получается из разложения оператора P. Собственные векторы $P|0\rangle$ и построенный в разделе I $|\psi\rangle$ пропорциональны друг другу; легко показать, что норма последнего равна $1/\langle 0|P|0\rangle$.

Собственное значение E_a определяется из уравнения $HP = E_aP$. Поскольку $\mathrm{Tr}P = \mathrm{Tr}P_0 = 1$, имеем (ур. (70))

$$E_a = \mathrm{Tr}\, HP = E_a^0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \left(\mathrm{Tr}\, B^{(n)}\right)$$

или

$$\varepsilon_n = \mathrm{Tr}\, B^{(n)}. \tag{73}$$

Так как каждый член в $B^{(n)}$ содержит по крайней мере один оператор P_0 и так как, в силу известного свойства следа, справедливо тождество

$$\mathrm{Tr}\, MP_0N = \mathrm{Tr}\, P_0NM = \langle 0|NM|0\rangle,$$

то легко преобразовать ε_n к виду среднего значения от некоторого оператора по невозмущенному состоянию $|0\rangle$. Первые члены разложения E_a равны

$$E_a = E_a^0 + \lambda\langle 0|V|0\rangle + \lambda^2\langle 0|V\frac{Q_0}{a}V|0\rangle +$$

$$+ \lambda^3\left(\langle 0|V\frac{Q_0}{a}V\frac{Q_0}{a}V|0\rangle - \langle 0|V\frac{Q_0}{a^2}V|0\rangle\langle 0|V|0\rangle\right) + \ldots, \tag{74}$$

что согласуется с результатами раздела I (ур. (12) и (26)).

Вырожденный случай: $g_a \neq 1$. Вместо того чтобы решать задачу на собственные значения оператора HP в $\mathscr{E}_a$, ее можно заменить аналогичной задачей диагонализации в $\mathscr{E}_a^0$.

Допустим, что любой вектор из подпространства $\mathscr{E}_a$ можно рассматривать как проекцию в $\mathscr{E}_a$ некоторого вполне определенного вектора из $\mathscr{E}_a^0$ (это предположение неявно использовалось в невырожденном случае). Поскольку $\mathscr{E}_a$ и $\mathscr{E}_a^0$ имеют одинаковую размерность, проектор P устанавливает взаимно однозначное соответствие между векторами из $\mathscr{E}_a$ и $\mathscr{E}_a^0$; можно

также показать, что и проектор P_0 устанавливает взаимно однозначное соответствие между векторами $\mathscr{E}_a$ и $\mathscr{E}_a^0$. Это условие «неортогональности» двух подпространств, очевидно, выполняется при достаточно малых λ.

Таким образом, каждый собственный вектор H в $\mathscr{E}_a$ можно представить в виде $P|E_a^0\alpha\rangle$ и справедливо уравнение

$$HP|E_a^0\alpha\rangle = E_aP|E_a^0\alpha\rangle.$$

Необходимым и достаточным условием такого равенства между векторами $\mathscr{E}_a$ является равенство их проекций в $\mathscr{E}_a^0$

$$P_0HP|E_a^0\alpha\rangle = E_aP_0P|E_a^0\alpha\rangle.$$

Обозначив

$$H_a = P_0HPP_0, \quad K_a = P_0PP_0, \tag{75}$$

перепишем предыдущее уравнение в виде

$$H_a|E_a^0\alpha\rangle = E_aK_a|E_a^0\alpha\rangle. \tag{76}$$

Операторы K_a и H_a можно рассматривать как эрмитовы операторы в пространстве $\mathscr{E}_a^0$. Уравнение (76) есть обобщенное уравнение на собственные значения. Собственные значения E_α — решения секулярного уравнения (см. § VII. 17)

$$\det(H_a - xK_a) = 0,$$

они являются искомыми значениями энергии, а проекции соответствующих собственных векторов $|E_a^0\alpha\rangle$ в $\mathscr{E}_a$ будут собственными векторами H.

Разложения H_a и K_a легко получаются из разложений HP и P соответственно (ур. (69) и (72))

$$K_a = P_0 - \lambda^2P_0V\frac{Q_0}{a^2}VP_0 + \ldots, \tag{77}$$

$$H_a = E_a^0K_a + \lambda P_0VP_0 + \lambda^2P_0V\frac{Q_0}{a}VP_0 + \ldots. \tag{78}$$

Для того чтобы получить собственное значение E_α с точностью до данного порядка, разложения H_a и K_a обрывают на том же порядке.

Результаты данного порядка, полученные таким методом, могут отличаться от результатов элементарной теории раздела II, но на величины высшего порядка. В первом порядке результаты обоих методов в точности совпадают. Сравнивая эти результаты, нужно также помнить, что вектор $|E_a^0\alpha\rangle$ отличается от вектора $|0\rangle$ элементарной теории, последний равен пределу $|E_a^0\alpha\rangle$ при $\lambda \to 0$.

Метод, очень близкий к методу Като, но приводящий к более простым разложениям, был сформулирован Блохом [1]). В основе этого метода лежит тот факт, что оператор U, определяемый равенствами

$$PP_0 \equiv UK_a, \quad UP_0 \equiv U \tag{79}$$

имеет простое разложение

$$U = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n U^{(n)}, \tag{80}$$

$$U^{(n)} = \sum_{(n)}{}' S^{k_1} V S^{k_2} V \ldots V S^{k_n} V P_0, \tag{81}$$

где $\sum_{(n)}{}'$ означает суммирование по всем наборам неотрицательных целых чисел $k_1, k_2, \ldots, k_n$, удовлетворяющих условиям

$$\begin{aligned} &k_1 + k_2 + \ldots + k_p \geqslant p \quad (p = 1, 2, \ldots, n-1), \\ &k_1 + k_2 + \ldots + k_n = n. \end{aligned} \tag{82}$$

Отметим, что $P_0 U = P_0$, а $PU = U$. Действие U на вектор пространства $\mathscr{E}_a^0$ дает вектор из $\mathscr{E}_a$, проекция которого в $\mathscr{E}_a^0$ есть исходный вектор.

Согласно определению U уравнение (75) эквивалентно следующему:

$$(P_0 H U - E_a) K_a \left| E_a^0 \alpha \right\rangle = 0, \tag{83}$$

которое в методе Блоха играет ту же роль, что и уравнение (75) в методе Като. Это обычное уравнение на собственные значения для неэрмитова оператора [2]) $P_0 H U \equiv H_a K_a^{-1}$ в пространстве $\mathscr{E}_a^0$. Собственные значения и являются искомыми значениями энергии; соответствующие собственные векторы $K_a \left| E_a^0 \alpha \right\rangle$ есть проекции на $\mathscr{E}_a^0$ собственных векторов оператора H, которые получаются действием оператора U. Разложение $P_0 H U$ легко следует из разложения U, если вспомнить, что

$$P_0 H U = E_a^0 P_0 + \lambda P_0 V U.$$

Несколько первых членов равны

$$P_0 H U = E_a^0 P_0 + \lambda P_0 V P_0 + \lambda^2 P_0 V \frac{Q_0}{a} V P_0 + \ldots$$

Видно, что они проще членов разложений H_a и K_a (ур. (77) и (78)).

---

[1]) *C. Bloch*, Nuclear Physics **6**, 329 (1958).

[2]) Рассматриваемый как оператор в пространстве $\mathscr{E}_a^0$ оператор K_a имеет обратный, а как оператор во всем гильбертовом пространстве — не имеет.

В невырожденном случае энергия равна

$$E_a = \langle 0 | HU | 0 \rangle,$$

откуда немедленно получаем коэффициенты ее разложения

$$\varepsilon_n = \sum_{(n-1)}' \langle 0 | VS^{k_1} VS^{k_2} V \ldots VS^{k_n} V | 0 \rangle.$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Взаимодействие $V(q)$ добавлено к гамильтониану $(p^2 + m^2\omega^2 q^2)/2m$. Вычислить в первом и втором порядках теории возмущений сдвиги энергетических уровней в следующих двух случаях:

(а) $V = \frac{1}{2} m\alpha^2 q^2$,

(б) $V = bq$.

В обоих случаях сдвиги можно вычислить точно. Сравнить точные ответы с результатами теории возмущений.

2. Рассмотрим атом водорода в теории Шредингера (глава XI). До какой степени снимается вырождение каждого уровня постоянным электрическим полем $\mathscr{E}$ (взаимодействие $-e\mathscr{E}r$)? Показать, что уровень $n = 2$ расщепляется в первом порядке на три эквидистантных уровня (расстояние между уровнями равно $3\mathscr{E}\hbar^2/me$), и определить кратность вырождения каждого.

3. Показать, что в приближении центрального поля полный момент, полный орбитальный момент и полный спин электронов замкнутой оболочки равны нулю. Используя этот результат, показать, что число линейно независимых векторов (LSM_LM_S) для данной конфигурации определяется только электронами незамкнутой оболочки.

4. Определить спектральные термы конфигурации основного состояния атома углерода при jj-связи. Показать, что для полного момента J при jj- и LS-связях (§ 11) получается одно и то же значение с одинаковой кратностью. Объяснить, почему.

5. Конфигурация основного состояния атома азота ($Z=7$) есть $1s^2\,2s^2\,2p^3$. Какие различные спектральные термы получатся при LS-связи?

6. Использовать метод § 13 для изучения сложных атомов из § 9, 10, 11. Перечислить свойства симметрии операторов H_C, V_1 и V_2 и показать, в какой степени снимает вырождение уровней H_C последовательное включение возмущений V_i $(i = 1, 2)$: (а) при LS-связи, (б) при jj-связи.

7. Конфигурация основного состояния атома натрия ($Z = 11$) есть $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^1$, а первая возбужденная конфигурация — $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3p^1$. Следовательно, основное состояние натрия есть $S_{1/2}$, а два первых возбужденных состояния — $^2P_{1/2}$ и $^2P_{3/2}$. Исследовать влияние на эти уровни постоянного магнитного поля $\mathscr{H}$. Вычислить соответствующие множители Ланде. При постепенном увеличении интенсивности $\mathscr{H}$ из области эффекта Зеемана переходят в область эффекта Пашена — Бака. Получить выражение для уровней ^2P как функцию параметра $\rho = \mu_B\mathscr{H}/A\hbar^2$, где μ_B — магнетон Бора, A — константа

спин-орбитальной связи, введенная в § 11 ($A > 0$); нарисовать соответствующие кривые.

8. Исследовать тот же вопрос, что и в предыдущей задаче, для основного состояния (^3P) атома углерода. (Уровни получаются как корни секулярных уравнений, одно из которых третьей степени; основные характеристики кривых можно получить, не решая эти уравнения.)

9. Различные уровни $E_1, E_2, \ldots, E_n$, полученные из g_a-кратно вырожденного уровня при введении возмущения V, можно охарактеризовать их «центром тяжести» $\langle E\rangle$ и среднеквадратичным отклонением ΔE, определяемыми соотношениями (обозначения § 8):

$$\langle E\rangle = \frac{1}{g_a}\sum_{i=1}^{n} g_i E_i, \quad (\Delta E)^2 = \frac{1}{g_a}\sum_{i=1}^{n} (E_i - \langle E\rangle)^2.$$

Показать, что в первом порядке по V имеем

$$\varepsilon \equiv \langle E\rangle - E_a^0 \approx \frac{1}{g_a}\operatorname{Tr} P_0 V, \quad (\Delta E)^2 \approx \frac{1}{g_a}\operatorname{Tr}\, P_0 (V-\varepsilon)\, P_0 (V-\varepsilon).$$

Использовать эти формулы для возмущения

$$V = A(\boldsymbol{LS}) + \frac{e\hbar}{2mc}\mathcal{H}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S})$$

из двух предыдущих задач. Показать, что в этих случаях $\varepsilon = 0$; определить зависимость и исследовать изменение ΔE как функции параметра ρ из задачи 7.

ГЛАВА XVII

ПРИБЛИЖЕННЫЕ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

§ 1. Изменение «представления» и рассмотрение части гамильтониана по теории возмущений

Данная глава содержит два раздела и посвящена методам построения приближенных решений зависящего от времени уравнения Шредингера. По известному динамическому состоянию исследуемой квантовой системы в момент времени t_0 требуется определить динамическое состояние этой системы в момент времени t. Следовательно, задача состоит в построении, по возможности наиболее точном, оператора $U(t, t_0)$, который описывает эволюцию во времени динамических состояний системы в представлении Шредингера.

Напомним вкратце основные свойства оператора $U(t, t_0)$. Если гамильтониан системы $H(t)$ известен, то этот оператор однозначно определен и является решением интегрального уравнения

$$U(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t} H(\tau)\, U(\tau, t_0)\, d\tau \tag{1}$$

или, что эквивалентно, решением уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)\, U(t, t_0) \tag{2}$$

с начальным условием

$$U(t_0, t_0) = 1. \tag{3}$$

Поскольку $H(t)$ — эрмитов оператор, то U — унитарный

$$U(t, t')\, U^{+}(t, t') = U^{+}(t, t')\, U(t, t') = 1. \tag{4}$$

Более того, справедлив закон композиции [1])

$$U(t, t') = U(t, t'')\, U(t'', t'), \tag{5}$$

[1]) Для доказательства этого закона композиции, физический смысл которого очевиден, заметим, что, если V — унитарный оператор, не зависящий от t, то оператор $U(t, t'')V$ является решением уравнения Шредингера (2). Для того чтобы он был равен $U(t, t')$ при всех t, достаточно, чтобы равенство выполнялось при некотором значении t, например, при $t = t''$, это дает $V = U(t'', t')$.

откуда следует

$$U^{\dagger}(t, t') = U(t', t). \tag{6}$$

Эквивалентное определение U можно получить, заменяя уравнение (1) на эрмитово сопряженное. Принимая во внимание (6), получаем

$$U(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t} U(t, \tau) H(\tau)\, d\tau. \tag{7}$$

Метод, описанный в настоящей главе, состоит в следующем. Предположим, что гамильтониан H представим в виде

$$H(t) \equiv H^{(0)}(t) + V(t), \tag{8}$$

где $H^{(0)}(t)$ — гамильтониан уравнения Шредингера, решения которого известны. Пусть $U^{(0)}(t, t_0)$ — оператор эволюции, отвечающий $H^{(0)}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)}(t, t_0) = H^{(0)}(t)\, U^{(0)}(t, t_0), \quad U^{(0)}(t_0, t_0) = 1. \tag{9}$$

Поскольку оператор $U^{(0)}(t, t_0)$ известен, то для определения U достаточно найти унитарный оператор

$$U_I(t, t_0) \equiv U^{(0)\dagger}(t, t_0)\, U(t, t_0). \tag{10}$$

Физическое значение оператора U_I обсуждалось в § VIII. 14. U_I — оператор эволюции состояний в промежуточном «представлении», получающемся из представления Шредингера унитарным преобразованием $U^{(0)\dagger}(t, t_0)$. Простое вычисление, детали которого приведены в § VIII. 14, показывает, что зависимость U_I от времени определяется гамильтонианом

$$V_I(t) \equiv U^{(0)\dagger}(t, t_0)\, V(t)\, U^{(0)}(t, t_0). \tag{11}$$

Другими словами, $U_I(t, t_0)$ есть решение уравнения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I(t)\, U_I(t, t_0), \quad U_I(t_0, t_0) = 1 \tag{12}$$

или, что эквивалентно,

$$U_I(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t} V_I(\tau)\, U_I(\tau, t_0)\, d\tau. \tag{13}$$

Оператор $U_I(t, t_0)$ обладает всеми свойствами оператора эволюции и, в частности, удовлетворяет уравнениям (1)—(7), в которых $H(t)$ следует заменить на $V_I(t)$.

Интегральные уравнения (1), (7), (13) можно, по крайней мере формально, решить методом итераций. Так, подставляя в правую часть (13) вместо $U_I(\tau, t_0)$ выражение

$$1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{\tau} V_I(\tau')\, U_I(\tau', t_0)\, d\tau',$$

получаем

$$U_I(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} V_I(\tau)\, d\tau + \\ + (i\hbar)^{-2}\int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau'\, V_I(\tau)\, V_I(\tau')\, U(\tau', t_0). \quad (14)$$

Последовательные итерации дают разложение

$$U_I(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t_0), \quad (15)$$

где $U_I^{(n)}$ есть интеграл

$$U_I^{(n)} \equiv (i\hbar)^{-n} \int_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\ldots>\tau_1>t_0} d\tau_n\, d\tau_{n-1} \ldots \\ \ldots d\tau_1\, V_I(\tau_n)\, V_I(\tau_{n-1}) \ldots V_I(\tau_1). \quad (16)$$

Учитывая определения (10) и (11), получаем следующее разложение для U:

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0), \quad (17)$$

$$U^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \int_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\ldots>\tau_1>t_0} d\tau_n\, d\tau_{n-1} \ldots \\ \ldots d\tau_1 U^{(0)}(t, \tau_n)\, V(\tau_n)\, U^{(0)}(\tau_n, \tau_{n-1})\, V(\tau_{n-1}) \ldots \\ \ldots U^{(0)}(\tau_2, \tau_1)\, V(\tau_1)\, U^{(0)}(\tau_1, t_0). \quad (18)$$

Разложения (15) и (17) представляют собой ряды по степеням V, которые сходятся тем лучше, чем ближе $U^{(0)}(t, t_0)$ к $U(t, t_0)$. Они служат отправной точкой для вычислений этой главы. Оператор $U^{(0)}$ суть приближение нулевого порядка, а $U^{(1)}$, $U^{(2)}$, ..., $U^{(n)}$, ... отвечают поправкам 1-го, 2-го, ..., n-го, ... порядков к этому приближению. Сложность вычисления этих поправок быстро растет с увеличением их порядка и обычно ограничиваются поправками низшего порядка.

Раздел I. **НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ**

§ 2. Определение и вычисление по теории возмущений вероятностей переходов

Приведенные выше рассуждения можно использовать, в частности, тогда, когда $H^{(0)}$ не зависит от времени. В этом случае оператор эволюции $U^{(0)}(t, t_0)$ имеет простой вид

$$U^{(0)}(t, t_0) = \exp\left[-iH^{(0)}(t - t_0)/\hbar\right]. \tag{19}$$

Предположим, что собственные значения $H^{(0)}$ известны и, если не оговорено противное, спектр $H^{(0)}$ будем считать для простоты дискретным. Обозначим $|a\rangle, |b\rangle, \ldots, |k\rangle \ldots$ полный набор собственных векторов оператора $H^{(0)}$, а $E_a^0, E_b^0, \ldots, E_k^0, \ldots$ — отвечающие им собственные значения. Будем использовать также обозначения

$$\omega_{kl} = (E_k^0 - E_l^0)/\hbar, \tag{20}$$

$$V_{kl}(t) = \langle k | V(t) | l \rangle, \tag{21}$$

где ω_{kl} — частота Бора, отвечающая переходу $l \to k$, а $V_{kl}(t)$ — соответствующий матричный элемент $V(t)$.

Предположим, что в момент времени t_0 система находилась в состоянии, собственном для $H^{(0)}$, например, в состоянии a. Мы хотим вычислить вероятность того, что при измерении в момент времени t система будет находиться в другом собственном состоянии оператора $H^{(0)}$, например, в состоянии b. Эту величину, которую, по определению, будем называть *вероятностью перехода из a в b*, обозначим через $W_{a\to b}$. Ясно, что

$$W_{a\to b} = |\langle b | U(t, t_0) | a \rangle|^2. \tag{22}$$

Если бы V равнялось нулю, то вектор, представляющий состояние системы в момент времени t, отличался бы от вектора начального состояния $|a\rangle$ только фазовым множителем $\exp\left[-iE_a^0(t - t_0)/\hbar\right]$ и вероятность перехода $W_{a\to b}$ была бы равна нулю. Разложение амплитуды вероятности $\langle b | U(t, t_0) | a \rangle$ в ряд по степеням V получается подстановкой вместо $U(t, t_0)$ разложения (17)

$$\langle b | U(t, t_0) | a \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle b | U^{(n)} | a \rangle, \tag{23}$$

где $U^{(n)}$ определяется формулой (18).

В представлении $\{H^{(0)}\}$ вклады низших порядков в амплитуду равны

$$\langle b\,|\,U^{(1)}\,|\,a\rangle = -i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} d\tau\left[e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar}V_{ba}(\tau)\,e^{-iE_a^0(\tau-t_0)/\hbar}\right], \qquad (24^1)$$

$$\langle b\,|\,U^{(2)}\,|\,a\rangle =$$

$$= (i\hbar)^2\sum_k\int_{t_0}^{t} d\tau\int_{t_0}^{\tau} d\tau'\left[e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar}V_{bk}(\tau)\,e^{-iE_k^0(\tau-\tau')/\hbar}\times\right.$$

$$\left.\times V_{ka}(\tau')\,e^{-iE_a^0(\tau'-t_0)/\hbar}\right], \qquad (24^2)$$

$$\langle b\,|\,U^{(3)}\,|\,a\rangle =$$

$$= (i\hbar)^3\sum_k\sum_l\int_{t_0}^{t} d\tau\int_{t_0}^{\tau} d\tau'\int_{t_0}^{\tau'} d\tau''\left[e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar}\,V_{bk}(\tau)\times\right.$$

$$\left.\times e^{-iE_k^0(\tau-\tau')/\hbar}V_{kl}(\tau')\,e^{-iE_l^0(\tau'-\tau'')/\hbar}V_{la}(\tau'')\,e^{-iE_a^0(\tau''-t_0)/\hbar}\right]. \qquad (24^3)$$

В приведенных равенствах суммирование происходит по всем базисным векторам представления $\{H^{(0)}\}$.

Вклады различных порядков можно схематически изобразить посредством диаграмм рис. 10.

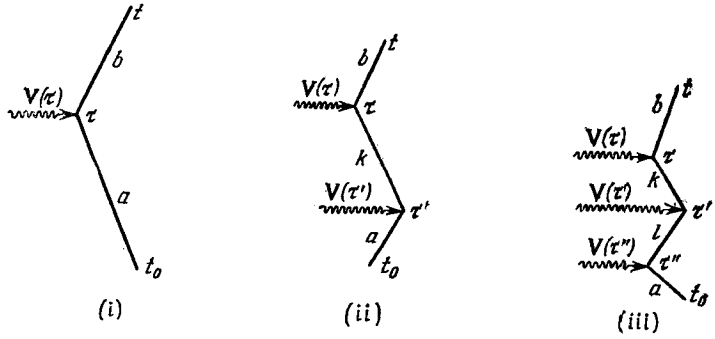


Рис. 10. Диаграммы, изображающие вклады различных порядков в амплитуду вероятности перехода из a в b: (i) первого порядка, (ii) второго порядка, (iii) третьего порядка.

Диаграмма (i) представляет вклад первого порядка или, более точно, произведение, стоящее в скобках в правой части (24^1). Непрерывная линия отвечает эволюции системы во времени. От t_0 до τ эволюция определяется невозмущенным гамильтонианом $H^{(0)}$ и система, следовательно, остается в состоянии a, вектор состояния умножается просто на множитель

$\exp[-iE_a^0(\tau - t_0)/\hbar]$. В момент времени τ система под действием возмущения переходит из a и b, что выражается матричным элементом перехода $V_{ba}(\tau)$. От τ до t эволюция вновь определяется $H^{(0)}$, и система остается в состоянии b, а вектор состояния умножается на $\exp[-iE_b^0(t-\tau)/\hbar]$. Следуя по диаграмме снизу вверх, получаем три множителя, которые расположены в скобках справа налево. Вклад первого порядка получается после интегрирования этого произведения по τ.

Точно так же диаграмма (ii) представляет поправку второго порядка. Эволюция системы от t_0 до τ' определяется $H^{(0)}$, затем под влиянием $V(\tau')$ система переходит из состояния a в промежуточное состояние k, эволюция от τ' до τ определяется $H^{(0)}$, в момент времени τ под влиянием $V(\tau)$ система переходит из состояния k в конечное состояние b, после чего ее развитие во времени от τ до t вновь определяется оператором $H^{(0)}$. Таким образом, мы получаем пять множителей, расположенных в скобках правой части (24²) справа налево. Вклад второго порядка получается интегрированием по τ' и $\tau (t_0 < \tau' < \tau < t)$ и суммированием по всем промежуточным состояниям. Имея в виду такой способ описания развития во времени переходов второго порядка, состояние k часто называют *виртуальным состоянием*, в отличие от состояний a и b, и говорят, что переход второго порядка происходит через виртуальное состояние.

Таким же образом, переходы третьего порядка, представленные диаграммой (iii), происходят через два виртуальных состояния k и l. Возмущающий потенциал появляется последовательно три раза в моменты времени τ'', τ' и τ, переводя систему из состояния a в l, из l в k и из k в b. Аналогично переходы n-го порядка происходят через $(n-1)$ виртуальных состояний.

Взяв n первых членов разложения (23), получаем искомую амплитуду вероятности с точностью до порядка n. Квадрат модуля этой амплитуды дает, по определению, вероятность перехода [1]) порядка n:

$$W_{a\to b} \approx \left| \langle b|U^{(1)}|a\rangle + \langle b|U^{(2)}|a\rangle + \ldots + \langle b|U^{(n)}|a\rangle \right|^2.$$

В частности, *вероятность перехода в первом порядке* дается формулой

$$W_{a\to b} \approx \left| \langle b|U^{(1)}|a\rangle \right|^2 = \hbar^{-2} \left| \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ba}\tau} V_{ba}(\tau)\, d\tau \right|^2. \qquad (25)$$

[1]) Полученное выражение представляет разложение $W_{a\to b}$ по степеням V по меньшей мере с точностью до $(n+1)$-го порядка. Полученная точность будет выше $(n+1)$-го порядка, если $\langle b|U^{(1)}|a\rangle = 0$.

Отметим, что в этом приближении

$$W_{a\to b} \approx W_{b\to a}.$$

Последнее соотношение, вообще говоря, перестает выполняться в высших порядках. Его не следует смешивать со свойством микрообратимости, т. е. с равенством $W_{Kb\to Ka} = W_{a\to b}$, которое выполняется только, когда гамильтониан инвариантен относительно обращения времени; в этом случае равенство выполняется во всех порядках (§ XV. 20).

§ 3. Полуклассическая теория кулоновского возбуждения ядер

В качестве приложения рассмотрим кулоновское возбуждение ядра заряженной частицей, например, протоном [1]).

Предположим, что монохроматический пучок протонов сталкивается с ядерной мишенью. В результате столкновений ядра мишени совершают переходы из основного состояния α в возбужденные состояния. Вычислим сечение перехода в данное возбужденное состояние β.

Обозначим Ze заряд ядра, R — его радиус, J_α и J_β, E_α и E_β — спины и энергии состояний α и β соответственно. Имеется $(2J_\alpha + 1)$ линейно независимых состояний α, которые можно отличать друг от друга по величине компоненты M_α спина по направлению данной оси квантования; этим состояниям соответствуют векторы $|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle$. Если H_N — гамильтониан ядра, то

$$H_N|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle \quad (M_\alpha = -J_\alpha, \ldots, J_\alpha),$$
$$H_N|\beta J_\beta M_\beta\rangle = E_\beta|\beta J_\beta M_\beta\rangle \quad (M_\beta = -J_\beta, \ldots, J_\beta).$$

Обозначим $E = Mv^2/2$ энергию столкновения в системе центра масс протона и ядра, $\Delta E = E_\beta - E_\alpha$ — энергию возбуждения ядра, Ω_α — направление налетающего протона, Ω_β — направление неупруго рассеянного протона и θ — угол между этими направлениями. Нам нужно вычислить величину

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\Big|_{\Omega_\alpha M_\alpha\to\Omega_\beta M_\beta},$$

т. е. сечение процесса, в котором протон неупруго рассеивается в направлении Ω_β, а ядро переходит из состояния $(\alpha J_\alpha M_\alpha)$ в состояние $(\beta J_\beta M_\beta)$.

Рассмотрим взаимодействие протона и ядра. Для больших расстояний r между протоном и ядром $(r \gg R)$ оно сводится

[1]) О кулоновском возбуждении и его приложении к изучению структуры ядра см.: *Adler et al.* Rev. Mod. Phys. 22, 432 (1956); приведенное здесь полуклассическое рассмотрение следует работе *К. А. Тер-Мартиросяна.* ЖЭТФ, 28 284 (1952).

к чисто кулоновскому взаимодействию Ze^2/r. С уменьшением r вид потенциала начинает отличаться от этой простой формы. Пока $r > R$, отличие имеет чисто электромагнитное происхождение и сводится в основном к разности между точным кулоновским взаимодействием и членом Ze^2/r

$$V = e^2 \sum_{i=1}^{Z} \left(\frac{1}{|r - r_i|} - \frac{1}{r} \right), \tag{26}$$

где r_i — координата i-го протона в ядре.

Как только протон «проникнет» в ядро ($r < R$), особо важную роль приобретут ядерные взаимодействия, которые будут значительно превышать электромагнитные взаимодействия.

Если энергия E достаточно мала, то кулоновское отталкивание Ze^2/r не позволяет протону приблизиться к ядру и, следовательно, остается доминирующим взаимодействием в течение всего процесса столкновения. Движение протона и ядра определяется тогда в первом приближении гамильтонианом

$$H^{(0)} \equiv H_N + \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + \frac{Ze^2}{r} \right),$$

где $\boldsymbol{p}^2/2M$ — кинетическая энергия протона. Движения протона и ядра полностью разделяются. Последнее остается в своем основном состоянии, в то время как протон упруго рассеивается, и дифференциальное сечение дается формулой Резерфорда (VI. 29)

$$d\sigma_R/d\Omega = \frac{1}{4} a^2 \sin^{-4} \frac{1}{2} \theta,$$

где a — половина наименьшего расстояния между протоном и ядром при классическом рассмотрении их движения

$$a = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{E}. \tag{27}$$

Данное приближение оправдано, если

$$a \gg R. \tag{28}$$

Дополнительно будем предполагать, что

$$\frac{\Delta E}{E} \ll 1, \tag{29}$$

$$\gamma \gg 1, \tag{30}$$

где

$$\gamma \equiv \frac{a}{\lambda\!\!\!^{-}} = \frac{Ze^2}{\hbar v}. \tag{31}$$

Из-за отличия взаимодействия протона и ядра от Ze^2/r могут произойти неупругие столкновения. Так как по условию (28)

протон лишь незначительно «проникает» в ядро, отличие сводится в основном к члену V. В силу условия (30) кулоновское рассеяние можно рассматривать классически (§ VI. 5). Движение протона есть движение волнового пакета пренебрежимо малых размеров, центр $\boldsymbol{r}(t)$ которого удовлетворяет соответствующим классическим уравнениям движения. В данном неупругом столкновении ($\Omega_\alpha M_\alpha \to \Omega_\beta M_\beta$) движение протона также можно рассматривать классически. Если пренебречь членом V, то решение классических уравнений движения известно. При этом требуется, чтобы можно было также пренебречь энергией ΔE, переданной в течение столкновения от протона ядру. Такое приближение оправдано, если выполнено условие (29). Так как траектория протона $\boldsymbol{r}(t)$ определена, *V становится зависящим от времени возмущением*, действующим на динамические переменные ядра

$$V(t) = e^2 \sum_{i=1}^{Z} \left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}(t) - \boldsymbol{r}_i|} - \frac{1}{r(t)} \right)$$

и может вызвать переход $(\alpha J_\alpha M_\alpha) \to (\beta J_\beta M_\beta)$. Поскольку вероятность перехода $W_{\alpha\to\beta}$ мала (*a posteriori* можно оправдать, что $W_{\alpha\to\beta} \ll 1$), то достаточно ограничиться приближением первого порядка. Формула (25) дает

$$W_{\alpha\to\beta} = \hbar^{-2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\Delta E)\, t/\hbar} \langle \beta J_\beta M_\beta | V(t) | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle \, dt \right|^2. \qquad (32)$$

Искомое сечение равно произведению этой вероятности на сечение Резерфорда

$$d\sigma|_{\Omega_\alpha M_\alpha \to \Omega_\beta M_\beta} = \left(\frac{1}{4} a^2 \sin^{-4} \frac{1}{2}\theta \right) W_{\alpha\to\beta}\, d\Omega. \qquad (33)$$

Остается вычислить $W_{\alpha\to\beta}$. Мы ограничимся только тем, что приведем схему вычислений. Обозначим (r_i, Ω_i) и (r, Ω) полярные координаты векторов $\boldsymbol{r}_i$ и $\boldsymbol{r}(t)$ соответственно; (r, Ω) зависят от t. Если разложить $|\boldsymbol{r}(t) - \boldsymbol{r}_i|^{-1}$ по сферическим функциям (ур. (B. 99)), то получим

$$V(t) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m Q_l^m T_l^{-m}, \qquad (34)$$

где

$$Q_l^m = \sum_{i=1}^{Z} e r_i^l Y_l^m(\Omega_i), \qquad (35)$$

$$T_l^m(t) = \frac{4\pi Z e}{2l+1} \frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}}. \qquad (36)$$

Разложение справедливо только при $r_i < r$, что в нашем случае всегда выполняется, поскольку протон не «проникает» в ядро. Подставляя разложение (34) в формулу (32), получаем

$$W_{\alpha\to\beta} = \Big| \sum_{lm} (-1)^m S_l^{-m} \langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle \Big|^2, \tag{37}$$

$$S_l^m = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\Delta E)\, t/\hbar} T_l^m(t)\, dt. \tag{38}$$

Коэффициенты S_l^m зависят только от классической траектории протона и могут быть найдены численным интегрированием.

Операторы Q_l^m $(m = -l, \ldots, +l)$ есть стандартные компоненты *электрического 2^l-польного момента* $\boldsymbol{Q}^{(l)}$ (см. § XIII.33). Следовательно, в формуле (37) отличны от нуля только те матричные элементы, которые удовлетворяют правилам отбора по моменту и четности

$$|J_\alpha - J_\beta| \leqslant l \leqslant J_\alpha + J_\beta, \quad m = M_\beta - M_\alpha, \tag{39}$$
$$\Pi_\alpha \Pi_\beta = (-1)^l$$

(Π_α, Π_β — четности состояний α и β соответственно). Кроме этого, согласно теореме Вигнера — Эккарта

$$\langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle = (2J_\beta + 1)^{-\frac{1}{2}} \langle J_\alpha l M_\alpha m | J_\beta M_\beta \rangle \langle \beta || \boldsymbol{Q}^{(l)} || \alpha \rangle.$$

В силу правил отбора (39) сумма в (37) ограничена конечным числом значений l определенной четности и только одним значением m. Грубая оценка показывает, что «$l+2$»-вклад составляет порядка $(R/\alpha)^2$ от «l»-вклада. Таким образом, можно оставить только член, отвечающий наименьшему значению l, допустимому правилами отбора: либо $|J_\alpha - J_\beta|$, либо $|J_\alpha - J_\beta| + 1$. Обозначив это значение l_0, имеем

$$W_{\alpha\to\beta} \approx \frac{\langle J_\alpha l_0 M_\alpha m | J_\beta M_\beta \rangle^2}{(2J_\beta + 1)} |S_{l_0}^{-m}|^2 |\langle \beta || \boldsymbol{Q}^{(l_0)} || \alpha \rangle|^2 \quad (m = M_\beta - M_\alpha).$$

Подставляя это выражение в формулу (33), получаем теоретическое значение для сечения, которое можно сравнить с экспериментальными данными.

В эксперименте, где ядра мишени не ориентированы и не наблюдается ориентация возбужденных ядер, измеряемое сечение получается усреднением определенного выше сечения по $2J_\alpha + 1$ возможным значениям M_α и суммированием по $2J_\beta + 1$ возможным значениям M_β. Принимая во внимание соотношения

ортогональности коэффициентов Клебша — Гордана, получаем

$$\frac{d\sigma_{\alpha\to\beta}}{d\Omega}=\frac{a^2}{4(2I_\alpha+1)(2I_\beta+1)}|\langle\beta||Q^{(l_0)}||\alpha\rangle|^2\left[\sin^{-4}\frac{1}{2}\theta\sum_m|S_{l_0}^m|^2\right].$$

Зависимость сечения от углов определяется выражением, стоящим в скобках, и должна быть найдена численно. Отметим, что начальное и конечное состояние ядра входит в эту формулу только посредством таких характеристик, как спин, четность и квадрат модуля матричного элемента электрического 2^{l_0}-польного момента $\langle\beta||Q^{(l_0)}||\alpha\rangle$, который фигурирует как множитель пропорциональности. Следовательно, сравнение полученной формулы с экспериментом дает непосредственный способ определения этих характеристик структуры ядра.

§ 4. Случай, когда V не зависит от времени. Сохранение невозмущенной энергии

Когда V не зависит явно от времени, интегрирование по времени в формулах (24) легко выполняется и полученные выражения обладают рядом интересных и простых свойств. Ограничимся обсуждением переходов первого порядка.

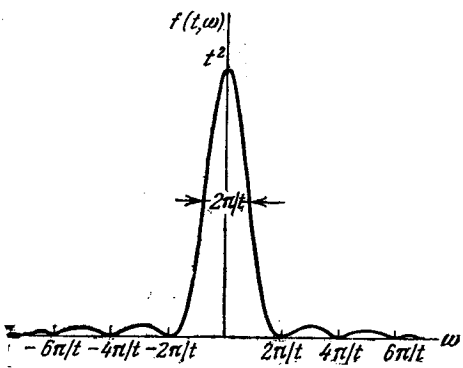


Рис. 11. Функция $f(t,\omega)=2(1-\cos\omega t)/\omega^2$.

Возьмем $t_0=0$, тогда по формуле (25) имеем

$$W_{a\to b}\approx|V_{ba}|^2 f(t,\omega_{ba})/\hbar^2, \tag{40}$$

где

$$f(t,\omega)\equiv\left|\int_0^t e^{i\omega\tau}\,d\tau\right|^2=$$
$$=2(1-\cos\omega t)/\omega^2. \tag{41}$$

Зависимость функции $f(t,\omega)$ от ω изображена на рис. 11. Отметим очень острый пик в окрестности $\omega=0$ ширины $2\pi/t$. Используя теорию вычетов, несложно показать, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t,\omega)\,d\omega=2\pi t \tag{42}$$

и согласно (А.15б)

$$f(t,\omega)\underset{t\to\infty}{\sim}2\pi\delta(\omega). \tag{43}$$

Для данного значения t величина $W_{a\to b}$ имеет простую зависимость от конечного состояния b. С точностью до константы она равна квадрату модуля матричного элемента возмущения $\langle b|V|a\rangle$, умноженного на функцию $f(t, \omega_{ba})$, которая зависит от частоты перехода $a \to b$. Поскольку этот множитель имеет ярко выраженный пик ширины $2\pi/t$ в точке $\omega_{ba} = 0$, переход будет происходить в основном в состояния с энергией в интервале шириной

$$\delta E_0 \approx 2\pi\hbar/t,$$

центр которого совпадает с энергией начального состояния. Другими словами, *переходы сохраняют невозмущенную энергию с точностью до* $2\pi\hbar/t$.

Этот результат в некотором смысле аналогичен соотношению неопределенности для энергии — времени (§ IV. 10 и VIII. 13). Однако следует отметить, что здесь фигурирует энергия не всей системы, включая возмущение, а лишь $H^{(0)}$, и время t есть время, после которого производят измерение $H^{(0)}$, а не время, характеризующее эволюцию системы.

Для данного состояния b зависимость $W_{a\to b}$ от t также определяется множителем $f(t, \omega_{ba})$. Если при переходе невозмущенная энергия точно сохраняется ($\omega_{ba} = 0$), то этот множитель растет как t^2. В противном случае он осциллирует между 0 и $4/\omega_{ba}^2$ с периодом $2\pi/\omega_{ba}$. Величина $W_{a\to b}$ осциллирует с тем же периодом около среднего значения $2|V_{ba}|^2/(E_b - E_a)^2$ и ведет себя как t^2 только для значений t, малых по сравнению с периодом.

Вместо того чтобы рассматривать переход в определенное состояние, можно рассматривать *переходы в группу состояний с близкими энергиями*. Именно так всегда поступают при исследовании переходов в состояния непрерывного спектра. Тогда, сделав некоторые дополнительные ограничения, которые в дальнейшем будут уточнены, можно определить *вероятность перехода в единицу времени*.

Итак, рассмотрим некоторую последовательность собственных векторов $H^{(0)}$, принадлежащих непрерывному спектру. Вектор из этой последовательности будем обозначать $|b\rangle$, а $E(b)$ — соответствующее собственное значение $H^{(0)}$.

При определении вероятностей перехода следует обратить внимание на нормировку векторов $|b\rangle$. Будем считать их нормированными так, что

$$\langle b|b'\rangle = \delta(b - b')/n(b),$$

где $n(b)$ — некоторая вещественная положительная функция. Проектор на состояния из области B переменной b есть (см.

§ VIII. 13)

$$P_B = \int_B |\, b\rangle\, n(b)\, db\, \langle b\,|.$$

Если выбрать $E(b)$ в качестве новой переменной и соответствующую область интегрирования обозначить $B(E)$, то получим

$$P_B = \int_{B(E)} |\, b\rangle\, \rho_b(E)\, dE\, \langle b\,|, \tag{44}$$

где

$$\rho_b(E) = n(b)\,\frac{db}{dE}, \tag{45}$$

эта величина известна как *плотность уровней b при энергии E*. Отметим, что $\rho_b(E)$ зависит от нормировки $|b\rangle$.

Вероятность перехода $W_{a\to B}$ в одно из состояний области B равна

$$W_{a\to B} = \langle a\,|\,U^+(t,0)\,P_B U(t,0)\,|\,a\rangle = \int_{B(E)} W_{a\to b}\rho_b(E)\,dE. \tag{46}$$

Формула (46) получена после подстановки вместо P_B выражения (44) и использования равенства

$$W_{a\to b} = |\,\langle b\,|\,U(t,0)\,|\,a\rangle\,|^2. \tag{47}$$

Здесь $W_{a\to b}$ формально представляет вероятность перехода $a \to b$, определяемую уравнением (22). Все преобразования, относящиеся к вычислению этой величины, полностью обоснованы и в данном случае. В частности, подставляя (40) в правую часть (46), получаем вероятность перехода $W_{a\to B}$ в первом порядке по возмущению

$$W_{a\to B} \approx \frac{1}{\hbar^2}\int |\,V_{ba}\,|^2 \rho_b f(t, \omega_{ba})\,dE, \tag{48}$$

где на зависимость от E величины $V_{ba} \equiv \langle b|V|a\rangle$ указывает параметр b.

В качестве конкретного примера рассмотрим переходы на уровни b, лежащие внутри интервала $(E_1 - {}^1/_2\varepsilon,\ E_1 + {}^1/_2\varepsilon)$, предполагая ε достаточно малым, чтобы V_{ba} и ρ_b были почти постоянны на этом интервале и их можно было вынести за знак интеграла. Предположим также, что t достаточно велико, так что ε много больше периода колебаний функции f

$$\varepsilon \gg 2\pi\hbar/t. \tag{49}$$

В этих предположениях интеграл в правой части формулы (48) легко вычисляется. Следует рассматривать два случая:

(i) Основной пик функции f лежит вне области интегрирования (переходы не сохраняют энергию). В этом случае можно

заменить f ее значением, усредненным по нескольким колебаниям, что дает не зависящее от времени выражение

$$W_{a\to B} \approx 2\varepsilon\, \rho_b(E_1)\, |V_{ba}|^2/(E_1 - E_a)^2.$$

(ii) Основной пик f лежит в области интегрирования (переходы, сохраняющие энергию). Тогда пик дает главный вклад в интеграл и расширение области интегрирования до всей оси ведет лишь к незначительным погрешностям, после чего получаем (ур. (42))

$$W_{a\to B} \approx 2\pi\hbar^{-1}\, |V_{ba}(E_a)|^2\, \rho_b(E_a)\, t.$$

В силу неравенства (49) эта вероятность превосходит сумму всех остальных.

Определим вероятность перехода в единицу времени как

$$w_{a\to B} \equiv dW_{a\to B}/dt.$$

В соответствии с предыдущими результатами можно заключить, что эта величина исчезает для переходов, не сохраняющих энергию, а для сохраняющих энергию переходов она дается важной формулой

$$w_{a\to B} \approx \frac{2\pi}{\hbar}\, |V_{ba}|^2\, \rho_b. \tag{50}$$

В этой формуле матричный элемент $V_{ba} \equiv \langle b|V|a\rangle$ и плотность уровней ρ_b относятся к состояниям b, энергия которых равна энергии начального состояния.

Для справедливости формулы (50) величина t должна быть достаточно велика для того, чтобы было выполнено условие (49) и достаточно мала для того, чтобы было оправдано приближение первого порядка ($w_{a\to B}t \ll 1$).

Приведенное доказательство обладает тем преимуществом, что демонстрирует значение формулы (50) и условия, при которых она справедлива. Эту формулу можно получить совсем просто, заменив в правой части выражения (40) функцию f ее асимптотикой (43), что дает

$$W_{a\to b} \sim 2\pi\hbar^{-1}\, |V_{ba}|^2\, \delta(E_b - E_a)\, t, \tag{51}$$

и подставив это в определение $W_{a\to B}$ (ур. (46)).

§ 5. Приложение к вычислению сечений в борновском приближении

Используя формулу (50), можно вывести выражение для сечений рассеяния в так называемом *борновском приближении*, т. е. в первом порядке по потенциалу взаимодействия частицы и мишени. Рассуждения будут простыми, но не совсем строгими. Строгое доказательство этой формулы будет дано в главе XIX.

Рассмотрим простейший из возможных случаев — рассеяние частицы на потенциале $V(r)$. Последний рассматривается как возмущение гамильтониана свободной частицы

$$H = H^{(0)} + V(r), \quad H^{(0)} = p^2/2m.$$

Плоские волны e^{ikr} являются собственными состояниями $H^{(0)}$. Такие волны представляют состояния частицы с импульсом $p = \hbar k$ и нормированной на единицу плотностью вероятности. Будем обозначать соответствующие кет-векторы $|k\rangle$, они удовлетворяют соотношениям ортогональности и полноты

$$\langle k | k' \rangle = (2\pi)^3 \delta(k - k'), \quad \int |k\rangle \frac{dk}{(2\pi)^3} \langle k| = 1.$$

В пространстве векторов k плотность нормированных таким образом состояний постоянна и равна $(2\pi)^{-3}$: число состояний в интервале $(k, k + dk)$ равно $dk/(2\pi)^3$. Мы интересуемся состояниями с импульсом в определенном направлении Ω и обозначим, как и в предыдущем параграфе, их плотность $\rho(E)$ (ур. (45)) (*a priori* эта функция могла бы зависеть от Ω, однако ниже мы увидим, что это не так): $\rho(E)\, d\Omega\, dE$ — число состояний с импульсами в телесном угле $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ и энергией $E = p^2/2m$ в интервале $(E, E + dE)$. Тогда имеем

$$\rho(E)\, d\Omega\, dE = \frac{dk}{(2\pi)^3} = \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

используя равенство $dp = p^2\, d\Omega\, dp$, получаем

$$\rho(E)\, dE = \frac{p^2\, dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

и, следовательно,

$$\rho(E) = \frac{p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE} = \frac{mp}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{52}$$

Перейдем к вычислению сечения рассеяния в заданное направление Ω_b монохроматического пучка энергии $E = mv_a^2/2$. Пусть $\hbar k_a$ — импульс налетающих частиц, а $\hbar k_b$ — импульс, соответствующий той же энергии, но в направлении Ω_b. Мы знаем, что вероятность в единицу времени $w_{a\to B} d\Omega$ системе перейти из начального состояния $|k_a\rangle$ в одно из состояний b с импульсом в телесном угле $(\Omega_b, \Omega_b + d\Omega)$ и энергией, близкой к E, дается в первом порядке формулой (50)

$$w_{a\to B}\, d\Omega \approx 2\pi\hbar^{-1} |\langle k_b | V | k_a \rangle|^2 \rho(E)\, d\Omega. \tag{53}$$

Пусть $d\sigma_{a\to b}/d\Omega$ будет дифференциальным сечением, тогда $\sigma_{a\to b}$ равно числу частиц, рассеянных в телесный угол $(\Omega_b, \Omega_b + d\Omega)$ за единицу времени при единичном падающем

потоке. Поскольку $|k_a\rangle$ отвечает волне со скоростью потока v_a, имеем

$$d\sigma_{a\to B} = w_{a\to B}/v_a.$$

Подставляя вместо $w_{a\to B}$ приближенное выражение (53), получаем

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} \approx \frac{2\pi}{\hbar v_a} |\langle k_b | V | k_a\rangle|^2 \rho_b(E), \tag{54}$$

где $\rho_b(E)$ — плотность конечных состояний (ур. (52)), а

$$\langle k_b | V | k_a\rangle \equiv \int e^{i(k_a - k_b)r} V(r)\, dr$$

есть матричный элемент потенциала, ответственного за переход.

§ 6. Периодическое возмущение. Резонансы

Вероятность $W_{a\to b}$ в первом порядке по потенциалу (формула (25)) пропорциональна квадрату модуля преобразования Фурье частоты ω_{ba} функции $V_{ba}(t)$, где мы условились считать $V_{ba} = 0$ вне интервала (t_0, t). Если V не зависит от t, то преобразование Фурье вычисляется элементарно и в результате, как мы видели, приходим к «сохранению невозмущенной энергии». Несложно провести гармонический анализ и в том случае, когда зависимость V от времени периодическая. Здесь возникает очень важное явление — *резонанс*.

Предположим, что V зависит от t по гармоническому закону с частотой ω. Так как V — эрмитов оператор, то его можно представить в виде

$$V = Ae^{i\omega t} + A^+ e^{-i\omega t},$$

где A — некоторый оператор, не зависящий от времени. Вероятность перехода $W_{a\to b}$ в первом порядке равна (считаем $t_0 = 0$)

$$W_{a\to b} \approx \hbar^{-2} \left| \langle b | A | a\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ba}+\omega)\tau} d\tau + \langle b | A^+ | a\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ba}-\omega)\tau} d\tau \right|^2,$$

что можно сравнить с выражением (40).

Амплитуда перехода здесь состоит из двух членов. Для достаточно больших t первый член мал, если только $\omega_{ba} + \omega$ не близко к 0, т. е. если только энергия не лежит в интервале (ширины $2\pi\hbar/t$) с центром в точке

$$E_b = E_a - \hbar\omega, \tag{55}$$

второй член мал вне интервала (той же ширины) с центром в точке

$$E_b = E_a + \hbar\omega. \tag{55'}$$

Практически всегда t достаточно велико ($t \gg 2\pi/\omega$) и эти интервалы не перекрываются. Значит $W_{a\to b}$ мало для всех переходов кроме тех, при которых *невозмущенная система излучает или поглощает энергию* $\hbar\omega$, на что указывают уравнения (55) и (55′) соответственно.

В первом случае вклад в амплитуду перехода дает только первый член и для вероятности перехода получаем выражение

$$W_{a\to b} \approx |A_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega)/\hbar^2.$$

Основное отличие этого выражения от (40) состоит в замене ω_{ba} на $\omega_{ba} + \omega$. В полной аналогии с рассуждениями § 4 можно рассмотреть переходы в группу уровней с энергией в интервале ΔE ($\gg 2\pi\hbar/t$) с центром в точке $E_a - \hbar\omega$ и при подходящих условиях определить вероятность перехода в единицу времени, которая вновь дается формулой (50) с тем отличием, что теперь V_{ba} и ρ_b относятся к состояниям b, энергия которых меньше энергии начального состояния на $\hbar\omega$. Те же рассуждения применимы к переходам, при которых система поглощает энергию $\hbar\omega$ (см. задачу 2).

Рассмотрим теперь более общий случай, когда V — произвольная периодическая функция t с частотой ω. Сформулируем кратко относящиеся к этому случаю результаты, доказательство которых предоставим читателю. Имеем разложение Фурье

$$V = \sum_{s=1}^{\infty} (A_s e^{is\omega t} + A_s^\dagger e^{-is\omega t}).$$

Если $t \gg 2\pi/\omega$, то в первом порядке вклады в вероятность перехода от различных членов этого ряда не интерферируют, поскольку каждый из них вызывает переходы, отвечающие различному изменению энергии. При «A_s-переходах» система теряет с точностью до $2\pi\hbar/t$ энергию $s\hbar\omega$; при «$A_s^\dagger$-переходах» система поглощает с точностью до $2\pi\hbar/t$ энергию $s\hbar\omega$.

Раздел II. МГНОВЕННОЕ И АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИЗМЕНЕНИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА

§ 7. Формулировка задачи и результаты

Часто возникает задача определения изменения состояния системы при изменении внешнего поля. Классический пример такой ситуации представляет атом, помещенный в магнитное поле. Как правило, получаемые результаты существенно зависят от времени T, в течение которого происходило изменение гамильтониана. В этом разделе мы исследуем предельные случаи,

когда T очень мало (мгновенное изменение) и очень велико (адиабатическое изменение).

Будем предполагать, что гамильтониан изменяется непрерывным образом от некоторого начального H_0 в момент времени t_0 до конечного H_1 в t_1. Обозначим

$$T = t_1 - t_0, \quad s = (t - t_0)/T,$$

а $H(s)$ — значение гамильтониана в момент времени $t = t_0 + sT$. Гамильтониан $H(s)$ — непрерывная функция s и

$$H(0) = H_0, \quad H(1) = H_1.$$

Эволюция системы от t_0 до t_1 зависит теперь только от параметра T, который определяет скорость перехода от H_0 к H_1. Удобно ввести обозначение

$$U(t, t_0) = U_T(s).$$

Задача заключается в определении оператора $U(t_1, t_0)$, т. е. $U_T(1)$, и исследовании его зависимости от T.

Особенно простые результаты получаются в упомянутых выше предельных случаях.

В пределе, когда $T \to 0$, т. е. *в случае бесконечно быстрого перехода, динамическое состояние системы остается неизменным*

$$\lim_{T \to 0} U_T(1) = 1. \tag{56}$$

В пределе, когда $T \to \infty$, т. е. *в случае бесконечно медленного или адиабатического перехода, если система первоначально находилась в собственном состоянии гамильтониана* H_0, *то в момент времени* t_1 при выполнении некоторых сформулированных ниже условий *система перейдет в собственное состояние* H_1, *которое получается из исходного состояния по непрерывности.* Этот важный результат известен как адиабатическая теорема [1]).

§ 8. Быстрый переход и мгновенное приближение

Первое из приведенных утверждений немедленно следует из интегрального уравнения (1), которому удовлетворяет оператор эволюции системы. Используя обозначения § 7, запишем

[1]) Она также называется теоремой Эренфеста. Работа Эренфеста относится к классической механике и старой квантовой теории. Перенос этой теоремы в квантовую механику сделан в работе: *M. Born and V. Fock.* Zeit. f. Phys. 51, 165 (1928). См. также *T. Kato,* Journ. Phys. Soc. Jup. 5, 435 (1950); *K. O. Friedrichs,* On the Adiabatic Theorem in Quantum Theory, Report IMM. NYU-218, New York, 1955.

его в виде

$$U_T(s) = 1 - i\hbar^{-1}T\int_0^s H(s)\,U_T(s)\,ds.$$

В пределе $T \to 0$ второе слагаемое в правой части стремится к нулю, и мы получаем нужный результат (56).

Для достаточно малых T в первом приближении можно предположить, что $U_T(1) \approx 1$. *Это приближение называется мгновенным.*

Обозначим $|0\rangle$ вектор состояния системы в момент времени t_0, и пусть Q — проектор на подпространство, ортогональное к $|0\rangle$. Считая норму $|0\rangle$ равной 1, имеем

$$Q_0 = 1 - |0\rangle\langle 0|.$$

Мгновенное приближение означает, что

$$U(t_1, t_0)\,|0\rangle \approx |0\rangle.$$

Величина ошибки при таком приближении дается вероятностью $\tilde{\omega}$ найти систему в состоянии, отличном от начального

$$\tilde{\omega} = \langle 0|U^{\dagger}(t_1, t_0)\,Q_0\,U(t_1, t_0)\,|0\rangle = \\ = \langle 0|U_T^{\dagger}(1)\,Q_0\,U_T(1)\,|0\rangle. \tag{57}$$

Поправку к этому приближению можно вычислить, используя описанную в § 1 теорию возмущений. В данном случае ($H^{(0)} = 0$, $V = H$) приближение первого порядка равно единичному оператору 1, и разложение (17) имеет вид

$$U_T(1) = 1 - i\hbar^{-1}T\int_0^1 H(s)\,ds + (i\hbar)^{-2}T^2\int_0^1 ds_1\int_0^{s_1} H(s_1)\,H(s_2)\,ds_2 + \ldots. \tag{58}$$

В частности, подставляя это разложение в правую часть (57), получаем разложение $\tilde{\omega}$ по степеням T. Поскольку $Q_0|0\rangle = 0$, член низшего порядка пропорционален T^2 и получается подстановкой двух первых членов разложения (58). Введем обозначение

$$\overline{H} = \int_0^1 H(s)\,ds = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_1} H\,dt. \tag{59}$$

Тогда имеем

$$\tilde{\omega} = \frac{T^2}{\hbar^2}\langle 0|\overline{H}Q_0\overline{H}|0\rangle + O(T^3).$$

И поскольку

$$\langle 0|\overline{H}Q_0\overline{H}|0\rangle = \langle 0|\overline{H}^2|0\rangle - \langle 0|\overline{H}|0\rangle^2 = (\Delta\overline{H})^2,$$

где $\Delta\bar{H}$ — средне-квадратичное отклонение наблюдаемой $\bar{H}$ в состоянии $|0\rangle$, получаем

$$\tilde{\omega} = \frac{T^2 (\Delta \bar{H})^2}{\hbar^2} + O(T^3). \tag{60}$$

Итак, условие применимости мгновенного приближения $\tilde{\omega} \ll 1$ требует, чтобы [1])

$$T \ll \hbar/\Delta\bar{H}. \tag{61}$$

Условие (61) является не чем иным как частной формой соотношения неопределенности для энергии и времени. Согласно определению (59) представляет собой гамильтониан системы, усредненный по интервалу (t_0, t_1). Грубо говоря, в этот интервал времени эволюцию системы определяет гамильтониан $\bar{H}$. В силу соотношения неопределенности для энергии и времени состояние системы, удовлетворяющей такому уравнению движения, не может заметно измениться за время, меньшее $\hbar/\Delta\bar{H}$. Следовательно, неравенство (61) действительно является условием того, что изменение состояния по прошествии промежутка времени T пренебрежимо мало.

§ 9. Мгновенное обращение магнитного поля

В качестве приложения рассмотрим, что произойдет с атомом в постоянном магнитном поле, если направление поля внезапно поменять на противоположное. Будем предполагать выполненными условия LS-связи и считать поле достаточно сильным для того, чтобы полностью отделить полный момент $\boldsymbol{L}$ от полного спина $\boldsymbol{S}$ (эффект Пашена — Бака). Для простоты будем считать, что магнитное поле все время параллельно оси z и меняется от значения $-\mathscr{H}_0$ до $\mathscr{H}_0$ по линейному закону

$$\mathscr{H}(t) = \mathscr{H}_0 [2s - 1] = \mathscr{H}_0 [2(t - t_0)/T - 1]. \tag{62}$$

Согласно результатам главы XVI (§§ 9—12) гамильтониан системы имеет вид

$$H = H^{(0)} + A(\boldsymbol{LS}) - \frac{e}{2mc}(L_z + 2S_z)\mathscr{H}(t), \tag{63}$$

где $H^{(0)}$ — невозмущенный гамильтониан в случае LS-связи. Поскольку согласно (62) среднее по времени от магнитного поля равно нулю, то среднее по времени от H равно гамильтониану атома в отсутствие внешнего поля

$$\bar{H} = H^{(0)} + A(\boldsymbol{LS}).$$

[1]) Условие $\tilde{\omega} \ll 1$ не требует, чтобы обязательно $U(t_1\, t_0)|0\rangle \approx |0\rangle$, оно требует только, чтобы эти векторы отличались лишь фазовым множителем. Однако формула (60) предполагает быструю сходимость разложения (58), и неравенство (61) является, вообще говоря, достаточным условием для такой сходимости.

Предположим теперь, что первоначально система находилась в собственном для H состоянии. Поскольку в этот момент выполняются условия, при которых имеет место эффект Пашена — Бака, то вектор состояния почти равен одному из векторов $|\alpha LSM_L M_S\rangle$, определенных в § XVI. 11. Будем считать, что $|0\rangle = |\alpha LSM_L M_S\rangle$. Вычисление средне-квадратичного отклонения $\Delta\overline{H}$ не представляет серьезных трудностей; так как $|\alpha LSM_L M_S\rangle$ есть собственный вектор $H^{(0)} + AL_z S_z$, то единственный вклад дает только член $^1/_2 A(L_+S_- + L_-S_+)$. Проведя вычисления, получаем

$$\Delta\overline{H} = \frac{1}{2} A\hbar^2 \left[2\left(L(L+1) - M_L^2\right)\left(S(S+1) - M_S^2\right) - 2M_L M_S\right]^{\frac{1}{2}}.$$

В скобках стоит числовой множитель порядка 1 (он равен нулю в двух предельных случаях, $M_L = \pm L$, $M_S = \pm S$). Следовательно, отклонение $\Delta\overline{H}$ равно по порядку величины $A\hbar^2$, т. е. порядку величины расщепления LS-уровней за счет спин-орбитальной связи.

Как следствие, если

$$T \ll \frac{1}{A\hbar}, \tag{64}$$

то выполняется условие быстрого перехода (61): вектор состояния остается практически тем же при изменении направления поля. Для того чтобы динамическое состояние атома оставалось тем же, достаточно, чтобы изменение вектора состояния сводилось только к домножению на фазовый множитель. Таким образом, неравенство (64) является достаточным, но не необходимым условием неизменности состояния при обращении поля. Мы вернемся к этому вопросу в конце § 14.

§ 10. Адиабатический переход. Общие положения. Тривиальный случай

В оставшейся части этого раздела исследуется другой крайний случай — очень медленное изменение гамильтониана. Мы будем использовать обозначения § 7.

Прежде всего, сформулируем адиабатическую теорему. В ней речь идет о свойствах состояний дискретного спектра гамильтониана $H(s)$. Будем для простоты предполагать спектр H дискретным, хотя это и несущественно [1]).

Пусть $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_j, \ldots$ — собственные значения H, а проекторы на соответствующие им подпространства обозначим

[1]) Достаточно, чтобы дискретные собственные значения и отвечающие им подпространства удовлетворяли сформулированным ниже условиям непрерывности, дифференцируемости и «не пересечения». См. *T. Kato.* loc. cit.

$P_1, P_2, \ldots, P_j, \ldots$. Все эти величины предполагаются *непрерывными функциями* s. Дополнительно будем считать, что:

(i) *собственные значения отличаются* друг от друга в течение всего перехода $0 \leqslant s \leqslant 1$

$$\varepsilon_j(s) \neq \varepsilon_k(s), \text{ каковы бы ни были } j \text{ и } k; \tag{65}$$

(ii) *производные* dP_j/ds, d^2P_j/ds^2 определены и кусочно-непрерывны на всем интервале.

Оператор эволюции $U_T(s)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{d}{ds} U_T(s) = TH(s) U_T(s), \tag{66}$$

а гамильтониан $H(s)$ определяется выражением

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s) P_j(s). \tag{67}$$

Адиабатическая теорема утверждает, что $U_T(s)$ *обладает асимптотическим свойством* [1])

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s) P_j(0) = P_j(s) \lim_{T\to\infty} U_T(s) \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{68}$$

Предположим сначала, что подпространства, отвечающие каждому собственному значению $H(s)$, не меняются

$$P_j(s) = P_j(0) \equiv P_j \quad (j = 1, 2, \ldots).$$

В этом случае гамильтониан $H(s)$ имеет простой вид

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s) P_j$$

и при любом s коммутирует с каждым из проекторов P_j. Следовательно, каждый проектор есть интеграл движения

$$U_T(s) P_j U_T^{\dagger}(s) = P_j. \tag{69}$$

Соотношение (69) верно для любых T и *a fortiori* для $T \to \infty$.

---

[1]) Это свойство эквивалентно приведенному в § 7. Действительно, если $|j\rangle$ — собственный вектор $H(0)$, отвечающий собственному значению $\varepsilon_j(0)$, то $P_j(0)|j\rangle = |j\rangle$, и свойство (68) дает

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle = P_j(s) \lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle,$$

т. е. вектор $U_T(s)|j\rangle$ при $T \to \infty$ стремится к вектору из подпространства, соответствующего $\varepsilon_j(s)$

Кроме этого, в данном частном случае уравнение (66) явно интегрируется и дает

$$U_T(s) = \exp\left(-iT\int_0^s H(\sigma)\,d\sigma/\hbar\right) = \\ = \sum_l e^{-iT\varphi_l(s)/\hbar} P_l, \tag{70}$$

где нами использовано обозначение

$$\varphi_l(s) = \int_0^s \varepsilon_l(\sigma)\,d\sigma. \tag{71}$$

Итак, если в момент времени t_0 вектор состояния системы был собственным вектором для H_0, отвечающим собственному значению $\varepsilon_l(0)$, то в момент времени t_1 вектор состояния будет отличаться от собственного только фазовым множителем

$$e^{-iT\varphi_l(1)/\hbar}.$$

§ 11. «Представление вращающихся осей»

Точно проинтегрировать уравнение Шредингера в общем случае не удается, так как собственные векторы гамильтониана $H(s)$ вращаются некоторым образом в гильбертовом пространстве. При рассмотрении общего случая первый этап заключается в устранении, насколько это возможно, такого вращения подходящим изменением «представления».

Введем для этого унитарный оператор $A(s)$, обладающий свойством

$$P_j(s) = A(s)\,P_j(0)\,A^{\dagger}(s) \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{72}$$

Унитарное преобразование $A(s)$ переводит любой базис из собственных векторов оператора $H(0)$ в базис из собственных векторов $H(s)$, причем соответствующие векторы связаны друг с другом непрерывным образом.

Преобразование $A(s)$ однозначно определяется начальным условием

$$A(0) = 1 \tag{73}$$

и дифференциальным уравнением

$$i\hbar\,dA/ds = K(s)\,A(s), \tag{74}$$

где $K(s)$ — подходящий эрмитов оператор. Для того чтобы выполнялись условия (72), необходимо и достаточно, чтобы опе-

ратор $K(s)$ удовлетворял коммутационным соотношениям

$$[K(s), P_j(s)] = i\hbar\, dP_j/ds \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{75}$$

Необходимость немедленно следует после дифференцирования обеих частей (72) по s. Соотношения (75) достаточны, так как если $A(s)$ и $P_j(s)$ удовлетворяют уравнениям (74) и (75), то выражение

$$A^\dagger(s)\, P_j(s)\, A(s)$$

не зависит от s (производная по s равна нулю) и равно своему начальному значению $P_j(0)$.

Соотношения (75) не определяют $K(s)$ однозначно, в частности, можно добавить к $K(s)$ оператор $\sum_k P_k(s) f_k(s) P_k(s)$, где $f_k(s)$ — произвольные операторы, зависящие от s. Другими словами, можно произвольно задавать проекции $P_j(s) K(s) P_j(s)$ $(j = 1, 2, \ldots)$. По причинам, которые станут понятны ниже, мы устраняем произвол, накладывая дополнительные условия

$$P_j(s)\, K(s)\, P_j(s) = 0 \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{76}$$

Это дает (задача 5)

$$K(s) = i\hbar \sum_j (dP_j/ds)\, P_j(s).$$

Унитарное преобразование $A^\dagger(s)$ переводит векторы и операторы шредингеровского «представления» в новое «представление» — «представление вращающихся осей». Наблюдаемая $H(s)$ преобразуется в

$$H^{(A)}(s) = A^\dagger(s)\, H(s)\, A(s)$$

и, используя равенства (67) и (72), имеем

$$H^{(A)}(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)\, P_j(0). \tag{77}$$

Точно так же $K(s)$ преобразуется в

$$K^{(A)}(s) = A^\dagger(s)\, K(s)\, A(s). \tag{78}$$

Оператор эволюции в новом «представлении» равен

$$U^{(A)}(s) \equiv A^\dagger(s)\, U_T(s). \tag{79}$$

Он определяется (см. § 1, ур. (12), где следует взять $V = TH - K$) уравнением и начальным условием

$$i\hbar\, dU^{(A)}/ds = [TH^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)]\, U^{(A)}(s), \tag{80}$$

$$U^{(A)}(0) = 1. \tag{81}$$

§ 12. Доказательство адиабатической теоремы

Уравнение (80) легко бы интегрировалось, если бы можно было пренебречь членом $K^{(A)}$ по сравнению с $TH^{(A)}$. Тогда мы имели бы тривиальный случай, рассмотренный в § 10. Обозначим $\Phi_T(s)$ решение соответствующего уравнения Шредингера

$$i\hbar\, d\Phi_T/ds = TH^{(A)}(s)\,\Phi_T(s), \tag{82}$$

$$\Phi_T(0) = 1. \tag{83}$$

Имеем (ур. (70))

$$\Phi_T(s) = \sum_j e^{-iT\varphi_j(s)/\hbar} P_j(0), \tag{84}$$

где φ_j определены равенством (71).

Используя определения (77) и (78), мы видим, что $H^{(A)}(s)$ и $K^{(A)}(s)$ не зависят от T. Следовательно, можно ожидать, что в пределе $T \to \infty$ влияние $K^{(A)}$ в правой части уравнения (80) будет полностью подавлено членом $TH^{(A)}$, и оператор $U^{(A)}(s)$ будет стремиться к $\Phi_T(s)$. Как мы увидим, это действительно имеет место, и (см. ур. (79))

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\,\Phi_T(s). \tag{85}$$

Для доказательства этого утверждения введем новое унитарное преобразование

$$W \equiv \Phi_T^+ U^{(A)} = \Phi_T^+ A^+ U_T. \tag{86}$$

Уравнение, которому удовлетворяет этот оператор, следует из уравнений (80) и (82). В интегральной форме оно имеет вид

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_0^s \overline{K}(\sigma)\, W(\sigma)\, d\sigma, \tag{87}$$

где

$$\overline{K}(s) \equiv \Phi_T^+(s)\, K^{(A)}(s)\,\Phi_T(s) = \tag{88}$$

$$= \Phi_T^+ A^+ K A \Phi_T. \tag{89}$$

Мы собираемся показать, что ядро $K(s)$ есть сумма осциллирующих функций, частоты которых неограниченно растут с ростом T и, как следствие, интеграл в правой части уравнения Вольтерра (87) стремится к нулю при $T \to \infty$.

Любой оператор Q допускает разложение [1])

$$Q = \sum_j \sum_k P_j(0)\, Q P_k(0).$$

[1]) Выбранный нами метод состоит в том, что используется представление, в котором оператор $H(0)$ диагонален, и в то же время устраняются различные трудности, связанные с вырождением собственных значений $H(0)$ и произволом в выборе фаз векторов базиса.

В дальнейшем мы используем обозначение

$$Q_{jk} \equiv P_j(0)\, Q P_k(0).$$

Используя уравнения (72), (84) и (89), получаем

$$\overline{K}_{jk} = e^{iT(\varphi_j - \varphi_k)/\hbar} K^{(A)}_{jk},$$

$$K^{(A)}_{jk} = A^{+}(s)\, P_j(s)\, K(s)\, P_k(s)\, A(s). \tag{90}$$

В силу условия (76) все $K^{(A)}_{jj}$ $(j = 1, 2, \ldots)$ исчезают и, следовательно, все диагональные части $\overline{K}_{jj}$ разложения $\overline{K}$ равны нулю

$$\overline{K}_{jj} = 0 \quad (j = 1, 2, \ldots). \tag{91}$$

Недиагональные части $\overline{K}_{jk}$ $(j \neq k)$ содержат осциллирующий множитель

$$e^{iT(\varphi_j - \varphi_k)/\hbar} \equiv \exp\left[i\hbar^{-1} T \int_0^s (\varepsilon_j(\sigma) - \varepsilon_k(\sigma))\, d\sigma \right].$$

Частота осцилляций получается дифференцированием фазы экспоненты по s, что дает

$$T\, |\varepsilon_j(s) - \varepsilon_k(s)|/\hbar.$$

Согласно предположению (65) разность $\varepsilon_j - \varepsilon_k$ никогда в нуль не обращается, и, следовательно, частота растет, как T, при $T \to \infty$.

Рассмотрим оператор

$$F(s) \equiv \int_0^s \overline{K}(\sigma)\, d\sigma. \tag{92}$$

Все его диагональные элементы в силу (91) равны нулю

$$F_{jj} = 0.$$

Недиагональные элементы имеют вид

$$F_{jk} = \int_0^s e^{iT(\varphi_j - \varphi_k)/\hbar} K^{(A)}_{jk}\, d\sigma \quad (j \neq k). \tag{93}$$

Операторы $K^{(A)}_{jk}$ непрерывно зависят от s и не зависят от T. Показатель же экспоненты зависит от T, и, следовательно, F_{jk} имеет вид $\int_0^s e^{iT\alpha(\sigma)} f(\sigma)\, d\sigma$, где $f(\sigma)$ — непрерывная функция, а $\alpha(\sigma)$ — непрерывная монотонная функция. Как известно, та-

кой интеграл стремится к нулю при $T \to \infty$. Действительно, интегрируя по частям, имеем

$$F_{jk}(s) = \\ = \frac{\hbar}{iT}\left[e^{iT(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar}\frac{K^{(A)}_{jk}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\Big|_0^s - \int_0^s e^{iT(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar}\left[\frac{d}{d\sigma}\left(\frac{K^{(A)}_{jk}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\right)\right]d\sigma\right]. \tag{94}$$

Ясно, что выражение в скобках остается конечным, если $K^{(A)}_{jk}$ и производные по s от $K^{(A)}_{jk}$, ε_j и ε_k остаются конечными. Следовательно, F_{jk} стремится к нулю, как $1/T$, т. е. при $T \to \infty$

$$F(s) = O\left(\frac{1}{T}\right).$$

После интегрирования по частям интеграл в правой части уравнения (87) можно переписать в виде

$$F(s)\,W(s) - \int_0^s F(\sigma)\frac{dW}{d\sigma}\,d\sigma$$

или, используя уравнение $dW/d\sigma = i\overline{K}W/\hbar$,

$$F(s)\,W(s) - i\hbar^{-1}\int_0^s F(\sigma)\,\overline{K}W(\sigma)\,d\sigma. \tag{95}$$

Оба члена в (95) содержат множителем $F(s)$ и, следовательно, при $T \to \infty$ стремятся к нулю, как $1/T$, а значит [1]),

$$W = 1 + O\left(\frac{1}{T}\right). \tag{96}$$

Подставляя (96) в формулу (86) — определение W, получаем

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\,\Phi_T(s)\left[1 + O\left(\frac{1}{T}\right)\right]. \tag{97}$$

---

[1]) Строго говоря, приведенные рассуждения справедливы только, если оператор $K(s)$ ограничен на всем интервале $(0, 1)$ (см. примечание на стр. 207). Тогда можно показать, что $\|F(s)\|$ стремится к нулю, как $1/T$, равномерно по s. Верхние оценки для $\|K(s)\|$ и $\|F(s)\|$ обозначим $\varkappa$ и ε соответственно. Поскольку операторы W, Φ и A унитарны, то нормы операторов K, $K^{(A)}$, F и FW равны. Точно так же равны нормы F и $F\overline{W}$. Следовательно,

$$\|FW\| \leqslant \varepsilon, \quad \Big\|\int_0^s F\overline{K}W\,d\sigma\Big\| < \varepsilon\varkappa s.$$

Используя для $W - 1$ формулу (95), получаем

$$\|W - 1\| \leqslant \varepsilon\,(1 + \varkappa s).$$

Поскольку $\Phi_T(s)$ коммутирует с проекторами $P_j(0)$ (см. ур. (84)), а унитарный оператор $A(s)$ обладает свойством (72), имеем

$$A(s)\,\Phi_T(s)\,P_j(0) = P_j(s)\,A(s)\,\Phi_T(s).$$

Отсюда и из асимптотики (97) следуют соотношения (68). ■

§ 13. Адиабатическое приближение

Если T достаточно велико или, точнее, *если образующие базис собственные векторы оператора $H(t)$ вращаются достаточно медленно*, то в первом приближении $U_T(1)$ можно заменить его асимптотикой

$$U(t_1, t_0) \equiv U_T(1) \approx A(1)\Phi_T(1). \tag{98}$$

Это и есть *адиабатическое приближение.*

Пусть $|0\rangle$ — нормированный вектор, представляющий состояние системы в момент времени t_0, а Q_0 — проектор на дополнительное подпространство. Адиабатическое приближение состоит в следующей замене:

$$U(t, t_0)\,|0\rangle \approx A(1)\,\Phi_T(1)|\,0\rangle.$$

Величина погрешности при таком приближении дается вероятностью η найти систему в момент времени t_1 в состоянии, отличном от $A(1)\Phi_T(1)\,|0\rangle$. Поскольку проектор на пространство, ортогональное этому вектору, равен

$$Q_1 \equiv A(1)\,\Phi_T(1)\,Q_0\Phi_T^{\dagger}(1)\,A^{+}(1),$$

получаем

$$\eta \equiv \langle 0\,|\,U^{+}(t_1, t_0)\,Q_1 U(t_1, t_0)\,|0\rangle = \\ = \langle 0\,|\,W^{+}(1)\,Q_0 W(1)|\,0\rangle.$$

Поправки к адиабатическому приближению можно вычислить методом теории возмущений из § 1. Оператор $A(1)\Phi_T(1)$ играет роль $U^{(0)}$, а $W(1)$ — роль U_I. Метод заключается в сохранении только начальных членов разложения W, которое получается итерированием уравнения (87). Если ограничиться только первым порядком, то получим

$$W(1) \approx 1 + (iF/\hbar), \tag{99}$$

где F — оператор $F(1)$, определенный равенством (92).

Это разложение можно использовать также и для вычисления η. Аналогично вычислению $\tilde{\omega}$ в случае мгновенного приближения, имеем

$$\eta \approx \hbar^{-2}\langle 0\,|FQ_0F\,|0\rangle = (\Delta F/\hbar)^2, \tag{100}$$

где ΔF — средне-квадратичное отклонение наблюдаемой F в состоянии $|0\rangle$. Условие применимости адиабатического приближения [1]) $\eta \ll 1$ дает

$$\Delta F \ll \hbar.$$

В приведенной здесь общей форме этот результат не так удобен для использования, как соответствующий результат в случае мгновенного приближения (соотношение (61)). Фигурирующую здесь наблюдаемую F построить гораздо труднее, чем наблюдаемую $\bar{H}$ из предыдущего случая. В то время как $\bar{H}$ получается просто интегрированием $H(t)$, для вычисления F необходимо решить задачу на собственные значения $H(t)$ для каждой точки из интервала (t_0, t_1) и для каждой точки построить оператор $A(s)$.

Проверим условия применимости адиабатического приближения в случае, когда система первоначально находилась в собственном для $H(0)$ состоянии. В действительности, только этот случай и представляет практический интерес.

В дальнейшем будем использовать непосредственно переменную t, не переходя к s. Обозначим $\varepsilon_j(t)$ собственные значения гамильтониана в момент времени t, соответствующие проекторы — $P_j(t)$, оператор «перехода к повернутым осям» — $A(t)$ и $\Phi(t)$ — оператор $\Phi_T(s)$. Тогда определения (67) и (84) изменяются

$$H(t) = \sum_j \varepsilon_j(t) P_j(t), \tag{101}$$

$$\Phi(t) = \sum_j \exp\left[-i\int_{t_0}^{t} \varepsilon_j(\tau)\, d\tau/\hbar\right] P_j(0). \tag{102}$$

Определяющие $A(t)$ уравнения (73) и (74) примут вид

$$i\hbar\, dA/dt = K'(t)\, A(t), \quad A(0) = 1, \tag{103}$$

где

$$K'(t) \equiv K(s)/T = i\hbar \sum (dP_j/dt)\, P_j(t). \tag{104}$$

Согласно определению (92) находим

$$F \equiv F(t_1) = \int_{t_0}^{t_1} \Phi^{\dagger}(t)\, A^{\dagger}(t)\, K'(t)\, A(t)\, \Phi(t)\, dt. \tag{105}$$

Дополнительно, для простоты, предположим, что спектр $H(t)$ простой (не вырожден). Выберем множество базисных век-

[1]) Здесь можно сделать те же замечания, что и в сноске к § XVII, 8, в связи с критерием применимости мгновенного приближения.

где ΔF — средне-квадратичное отклонение наблюдаемой F в состоянии $|0\rangle$. Условие применимости адиабатического приближения [1]) $\eta \ll 1$ дает

$$\Delta F \ll \hbar.$$

В приведенной здесь общей форме этот результат не так удобен для использования, как соответствующий результат в случае мгновенного приближения (соотношение (61)). Фигурирующую здесь наблюдаемую F построить гораздо труднее, чем наблюдаемую $\bar{H}$ из предыдущего случая. В то время как $\bar{H}$ получается просто интегрированием $H(t)$, для вычисления F необходимо решить задачу на собственные значения $H(t)$ для каждой точки из интервала (t_0, t_1) и для каждой точки построить оператор $A(s)$.

Проверим условия применимости адиабатического приближения в случае, когда система первоначально находилась в собственном для $H(0)$ состоянии. В действительности, только этот случай и представляет практический интерес.

В дальнейшем будем использовать непосредственно переменную t, не переходя к s. Обозначим $\varepsilon_j(t)$ собственные значения гамильтониана в момент времени t, соответствующие проекторы — $P_j(t)$, оператор «перехода к повернутым осям» — $A(t)$ и $\Phi(t)$ — оператор $\Phi_T(s)$. Тогда определения (67) и (84) изменяются

$$H(t) = \sum_j \varepsilon_j(t) P_j(t), \tag{101}$$

$$\Phi(t) = \sum_j \exp\left[-i\int_{t_0}^{t} \varepsilon_j(\tau)\, d\tau/\hbar\right] P_j(0). \tag{102}$$

Определяющие $A(t)$ уравнения (73) и (74) примут вид

$$i\hbar\, dA/dt = K'(t)\, A(t), \quad A(0) = 1, \tag{103}$$

где

$$K'(t) \equiv K(s)/T = i\hbar \sum (dP_j/dt)\, P_j(t). \tag{104}$$

Согласно определению (92) находим

$$F \equiv F(t_1) = \int_{t_0}^{t_1} \Phi^+(t)\, A^+(t)\, K'(t)\, A(t)\, \Phi(t)\, dt. \tag{105}$$

Дополнительно, для простоты, предположим, что спектр $H(t)$ простой (не вырожден). Выберем множество базисных век-

[1]) Здесь можно сделать те же замечания, что и в сноске к § XVII.8, в связи с критерием применимости мгновенного приближения.

Бора» перехода $i \to j$, $\alpha_{ji}(t)$ характеризует скорость вращения собственных векторов $H(t)$, она равна компоненте вдоль $|j\rangle_t$ скорости вращения оси $|i\rangle_t$.

Подынтегральное выражение в правой части (111) равно произведению функции $\alpha_{ji}(t)$ на осциллирующую с частотой $\omega_{ji}(t)$ экспоненту. Если α_{ji} и ω_{ji} не зависят от времени, то получаем

$$p_{i\to j} \approx \left|\frac{\alpha_{ji}}{\omega_{ji}}\right|^2 2(1-\cos\omega_{ji}T).$$

Следовательно, величина $p_{i\to j}$ имеет порядок $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$. Если же зависимость от времени α_{ji} и ω_{ji} достаточно гладкая, то $p_{i\to j}$ не превосходит по порядку величины максимального значения отношения $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$ на интервале (t_0, t_1)

$$p_{i\to j} \leqslant \max\left|\frac{\alpha_{ji}(t)}{\omega_{ji}(t)}\right|^2. \qquad (112)$$

Точно так же η_i по порядку величины не больше значения, получающегося суммированием правой части неравенства (112) по всем j, отличным от i. Обычно эта сумма не превосходит отношения $|\alpha_i^{\max}/\omega_i^{\min}|^2$, где $\omega_i^{\min}$ — наименьшее значение боровской частоты перехода из состояния i в ближайшее по энергии состояние, $\alpha_i^{\max}$ — максимальное значение положительной величины $\alpha_i(t)$, определяемой равенством

$$\alpha_i^2(t) = \sum_{j\neq i} |\alpha_{ji}(t)|^2.$$

Возвращаясь к определению α_{ji} (109) и замечая [1]), что

$${}_t\langle i\,|\left(\frac{d}{dt}\,|\,i\rangle_t\right) = 0, \qquad (113)$$

видим, что α_i есть длина вектора $d|i\rangle_t/dt$, т. е. «угловая скорость» вектора $|i\rangle_t$. Следовательно, в большинстве случаев ус-

[1]) Из соотношений (104) и (106) имеем

$$\frac{d}{dt}\,|\,j\rangle_t = \frac{d}{dt}A(t)\,|\,j\rangle_0 = \frac{dP_j}{dt}\,|\,j\rangle_t \quad (j=1, 2, \ldots).$$

Сравнивая этот результат с тем, который получается при дифференцировании тождества $P_j(t)\,|j\rangle_t = |j\rangle_t$, получаем $P_j\left(\frac{d}{dt}\,|\,j\rangle_t\right) = 0$. Следовательно,

$${}_t\langle j\,|\left(\frac{d}{dt}\,|\,j\rangle_t\right) = 0 \quad (j=1, 2, \ldots). \qquad (113')$$

Условие того, что векторы $|j\rangle_t$ являются собственными для оператора $H(t)$, определяет их с точностью до фазового множителя. Условие (113′) фиксирует этот фазовый множитель.

ловие $\eta \ll 1$ выполнено, если

$$\left|\frac{\alpha_i^{\max}}{\omega_i^{\min}}\right|^2 \equiv \left|\frac{\text{максимальная угловая скорость } |i\rangle_t}{\text{минимальная боровская частота для } |i\rangle_t}\right| \ll 1. \quad (114)$$

Условие (114) можно рассматривать как критерий применимости адиабатического приближения. В действительности оно слишком ограничительно, хотя имеет то преимущество, что с ним довольно просто обращаться. Следует отметить, в частности, что для вычисления $\alpha_i(t)$ или $|\alpha_{ji}(t)|$, которые фигурируют в правой части (112), нет необходимости знать $A(t)$, достаточно только решить задачу на собственные значения $H(t)$ и определить с точностью до фазового множителя векторы $|i\rangle_t$, $\langle j|_t$; кроме того, можно показать, что

$$\alpha_{ji}(t) = -\,{}_t\langle j|\frac{dH}{dt}|i\rangle_t/\hbar\omega_{ji}(t)$$

(см. задачу 6).

§ 14. Адиабатическое обращение магнитного поля

Вернемся к задаче § 9 и будем использовать те же обозначения. Начальные условия возьмем те же самые, но неравенство (64) больше не выполняется.

Поскольку гамильтониан системы определяется выражением (63), мы видим, что α, L, S и $M_J \equiv M_L + M_S$ — хорошие квантовые числа ($H(t)$ коммутирует с $J_z \equiv L_z + S_z$ для любых t). Следовательно, если $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ — начальный вектор состояния, то с течением времени он будет меняться, оставаясь в пространстве векторов, имеющих те же значения α, L, S и $M_L + M_S$.

Рассмотрим подробно случай, когда начальное состояние есть ^2P. Имеется всего 6 различных состояний ^2P — это линейные комбинации 6-ти базисных векторов $\left|\alpha\, 1\, \frac{1}{2}\, M_L M_S\right\rangle \left(M_L = 1, 0, -1;\ M_S = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$, которые мы будем обозначать $|M_LM_S\rangle$. Поскольку все они являются собственными векторами $H^{(0)}$, соответствующее собственное значение можно взять за нулевой уровень энергии. Легко определить отвечающие ему уровни энергии H (задача XVI.7), которые являются функциями параметра $\rho = \mu_B\mathcal{H}/A\hbar^2$ ($\mu_B \equiv e\hbar/2mc$ — магнетон Бора) и изображены на рис. 12. Каждый уровень отвечает вполне определенному значению $M_J = M_L + M_S$, а соответствующий собственный вектор, как показано на рисунке, стремится к некоторому вектору $|M_LM_S\rangle$ в каждом из пределов $\rho \to \pm\infty$. Мы рассмотрим последовательно случаи $M_J = {}^3/_2$ и $M_J = {}^1/_2$.

Рассмотрим вначале случай $M_J = {}^3/_2$. Существует только одно состояние с таким значением J_z, и отвечающий ему вектор есть $|1\,{}^1/_2\rangle$. Это собственный вектор H для любого t, и простое вычисление дает

$$H|1\,{}^1/_2\rangle = A\hbar^2({}^1/_2 - 2\rho(t))|1\,{}^1/_2\rangle.$$

Если начальное состояние атома есть $|1\,{}^1/_2\rangle$, то мы имеем описанный в § 10 случай, когда уравнение Шредингера тривиально

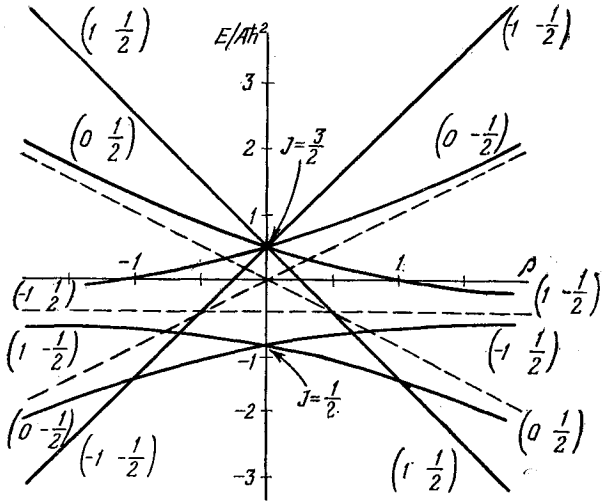


Рис. 12. Положение уровней ^2P как функции напряженности магнитного поля $\mathcal{H}$ ($\rho = \mu_B\mathcal{H}/A\hbar^2$). Числа в скобках у каждой кривой — квантовые числа $(M_L M_S)$ собственных состояний в двух предельных случаях: $\rho \to \pm\infty$.

интегрируется. Атом все время остается в этом состоянии, а вектор состояния приобретает только фазовый множитель

$$\exp\left[-iA\hbar\int_{t_0}^{t}({}^1/_2 - 2\rho(\tau))\,d\tau\right].$$

В случае линейного изменения магнитного поля (формула (62)) вектор состояния в момент времени T равен

$$\exp(-iA\hbar T)|1\,{}^1/_2\rangle,$$

что верно для любого T. В частности, в пределе, когда $A\hbar T \ll 1$, мы получаем результат мгновенного приближения, т. е. вектор $|1\,{}^1/_2\rangle$.

Рассмотрим теперь случай $M_J = {}^1/_2$, когда значению J_z отвечает два собственных вектора H — линейные комбинации век-

торов $|0\ {}^1/_2\rangle$ и $|1\ -{}^1/_2\rangle$. Для решения задачи на собственные значения $H(t)$ в подпространстве, натянутом на эти два вектора, выберем их в качестве базисных векторов, и тогда $H(t)$ будет представлен матрицей

$$A\hbar^2\begin{pmatrix} -\rho & \frac{1}{2}\sqrt{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Если ввести матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, то эту матрицу можно записать в особенно удобном виде

$$H(t) = \frac{1}{4} A\hbar^2 [(-2\rho - 1) + \boldsymbol{b}\boldsymbol{\sigma}], \tag{115}$$

где вектор $\boldsymbol{b}$ имеет следующие компоненты:

$$b_x = 2\sqrt{2}, \quad b_y = 0, \quad b_z = 1 - 2\rho.$$

Введем также единичный вектор $\boldsymbol{u}$ в направлении $\boldsymbol{b}$:

$$\boldsymbol{b} = b\boldsymbol{u}, \quad b = \sqrt{8 + (1 - 2\rho)^2},$$
$$\boldsymbol{u} \equiv \left(\frac{2\sqrt{2}}{b}, 0, \frac{1 - 2\rho}{b}\right). \tag{116}$$

Заметим, что вектор $\boldsymbol{b}$ и векторный оператор $\boldsymbol{\sigma}$ принадлежат трехмерному векторному пространству, которое, однако, не имеет ничего общего с обычным пространством. Мы использовали простой математический прием, позволивший нам вывести некоторые свойства посредством геометрических соображений, которые справедливы в обычном пространстве.

Из (115) и (116) получаем

$$H(t) = \frac{1}{4} A\hbar^2 [(-1 - 2\rho) + b(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{u})], \tag{117}$$

т. е. $H(t)$ есть функция оператора $(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{u})$. Задача на собственные значения теперь легко решается, они равны $\frac{1}{4} A\hbar^2(-1 - 2\rho \pm b)$, а проекторы $P_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{u})$.

Обозначим соответствующие собственные векторы $|+\rangle$ и $|-\rangle$. Они определены с точностью до фазы, которую можно фиксировать первым из условий (106), но поскольку эта фаза в дальнейшем несущественна, мы не будем на этом останавливаться. Легко проследить за непрерывной эволюцией этих уровней и соответствующих им проекторов как функций параметра $\rho(t)$ (рис. 13). Когда ρ меняется от $-\infty$ до $+\infty$, собственный вектор $|+\rangle$ меняется (исключая фазовый множитель) от $|0\ {}^1/_2\rangle$ до $|1\ -{}^1/_2\rangle$, а соответствующий уровень движется вдоль верх-

ней ветви гиперболы на рис. 13; в то же время собственный вектор $|-\rangle$ меняется от $|1\ -1/2\rangle$ до $|0\ 1/2\rangle$, а соответствующий уровень движется вдоль нижней ветви гиперболы.

Предположим, например, что начальное состояние системы есть $|0\ 1/2\rangle$. Если изменение направления поля происходит достаточно медленно, то вектором состояния системы всегда будет вектор $|+\rangle$ (с точностью до фазового множителя), и, после того как поле изменит свое направление на противоположное,

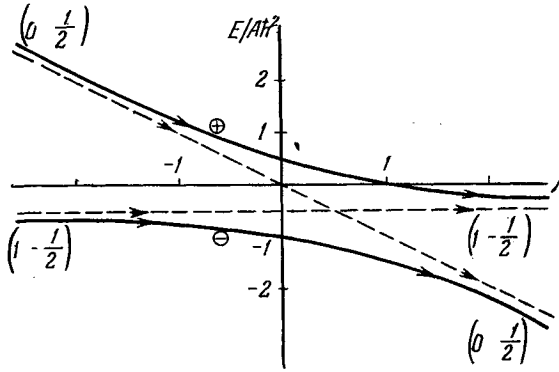


Рис. 13. Изменение двух уровней ^2P, $M_J = 1/2$, при обращении магнитного поля (обозначения те же, что и на рис. 3). Сплошная кривая соответствует адиабатическому обращению, пунктирная — мгновенному.

система будет находиться в состоянии $|1\ -1/2\rangle$. Используя результаты предыдущего параграфа, можно определить критерий адиабатичности этого перехода. Используя те же обозначения, находим (соотношение (112))

$$\eta_+ = p_{+\to-} \leqslant \max \left| \frac{\alpha(t)}{\omega(t)} \right|^2 \ll 1, \tag{118}$$

где $\omega(t)$ — боровская частота перехода $+ \to -$,

$$\omega(t) = \frac{1}{2} A\hbar b = \frac{1}{2} A\hbar \sqrt{8 + (1 - 2\rho)^2}$$

и $\alpha(t)$ — проекция скорости $|+\rangle$ на $|-\rangle$. Отсюда следует, что

$$|\alpha(t)| = |\langle - |(dP_+/dt)|+\rangle| = \frac{1}{2} |\langle - |(\sigma\, du/dt)|+\rangle|.$$

Так как вектор du/dt перпендикулярен u, а $|+\rangle$ и $|-\rangle$ — собственные векторы оператора (σu), то

$$|\alpha(t)| = \frac{1}{2} \left| \frac{du}{dt} \right| = \frac{\sqrt{8}}{8 + (1 - 2\rho)^2} \left| \frac{d\rho}{dt} \right|.$$

При изменении поля по линейному закону (62) максимум $|\alpha/\omega|$ достигается при $\rho = +{}^1/_2$, т. е.

$$\max\left|\frac{\alpha}{\omega}\right| = \frac{1}{2}\frac{\mu_B\mathscr{H}_0}{A\hbar^2}\frac{1}{A\hbar T}.$$

В этом случае условие (118) выполнено, если

$$T' \equiv \frac{2A\hbar^2}{\mu_B\mathscr{H}_0}T \gg (1/A\hbar), \tag{119}$$

где T' — время, необходимое для изменения магнитной энергии связи $\mu_B\mathscr{H}$ от $-2A\hbar^2$ до $2A\hbar^2$. Именно в течение этого периода вектор $|+\rangle$ вращается от $|0^1/_2\rangle$ к $|1-{}^1/_2\rangle$. Условие (119) показывает, что этот период должен быть велик по сравнению с $1/A\hbar$ — периодом, характеризующим переход $+ \to -$.

Интересно сравнить условие адиабатического перехода и условие быстрого перехода (64). Последнее, в действительности, является излишне ограничительным. Это необходимое условие для того, чтобы вектор состояния практически не менялся за все время T обращения поля. Однако за исключением определенного выше интервала T', собственные векторы гамильтониана остаются практически фиксированными в течение этого времени, а вектор состояния системы просто умножается на фазовый множитель. Для того чтобы динамическое состояние системы осталось неизменным, т. е. чтобы вектор состояния за время обращения поля изменился разве лишь на фазовый множитель, достаточно, чтобы условие быстрого перехода выполнялось только в интервале времени T', в течение которого происходит вращение собственных векторов H, т. е.

$$T' \ll 1/A\hbar \tag{120}$$

(см. задачу 8).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пусть u_1 и u_2 — два ортогональных собственных состояния, отвечающих двукратно вырожденному уровню гамильтониана H_0 системы. Введение постоянного возмущения V устраняет вырождение и расщепляет уровень на два с расстоянием ε между ними. Предположим, что система первоначально находится в состоянии u_1, а возмущение V действует в интервале времени T. Пусть $W_{1\to 2}$ — вероятность найти систему в состоянии u_2, после того как возмущение перестает действовать. Показать, что $W_{1\to 2}$ периодически зависит от T с частотой $\varepsilon/\hbar$ и что в пределе, когда $\varepsilon T \ll \hbar$, получается результат первого порядка теории возмущений. Что необходимо для того, чтобы $W_{1\to 2}$ исчезало, каково бы ни было T?

2. Атом водорода находится в электрическом поле $\mathscr{E} = \mathscr{E}_0 \cos \omega t$, осциллирующем с частотой ω, которая больше частоты ионизации атома $me^4/2\hbar^3$.

Если первоначально атом находится в основном состоянии, то какова вероятность в единицу времени перехода в ионизованное состояние (в предположении, что можно использовать плоские волны для описания ионизированных состояний)? Какого угловое распределение электронов, излучаемых в этом процессе возбуждения атома? [*N. B.* Данный процесс является фотоэлектрическим эффектом, для которого тем самым получено полуклассическое описание, при котором электрическое поле не квантуется... Результаты совпадают с теми, которые получаются при корректном подходе с квантованным электромагнитным полем (см. задачу XXI. 12).]

3. При β-распаде атомное ядро испускает электрон со скоростью, которая обычно близка к c, и заряд ядра меняется от Ze до $(Z+1)e$. Показать, что влияние такого перехода на другие электроны можно рассматривать в мгновенном приближении. Оправдать применение метода в случае перехода тритона H^3 ($\equiv$ 1 протон + 2 нейтрона) в He^3 ($\equiv$ 1 нейтрон + 2 протона), где средняя кинетическая энергия испущенного электрона только 16 *кэв* ($mc^2 =$ = 500 *кэв*). Первоначально тритон находится в основном состоянии. Какова вероятность найти после распада ион He^+ в $1s$-состоянии? В $2s$-состоянии, в состоянии с $l \neq 0$?

4. Пусть $H(t)$ — гамильтониан неконсервативной системы. Предположим, что существует не зависящий от времени вектор $|u\rangle$, удовлетворяющий уравнению $H(t)|u\rangle = \varepsilon(t)|u\rangle$. Показать, что вектор

$$\exp\left(-i\int_{t_0}^{t}\varepsilon(\tau)\,d\tau/\hbar\right)|u\rangle$$

удовлетворяет уравнению Шредингера для этой системы.

5. Пусть $P_1, P_2, \ldots, P_j, \ldots$ — полный набор ортогональных проекторов. Предположим, что каждый из них есть непрерывная и дифференцируемая функция параметра s и что при изменении s сохраняются соотношения ортогональности и полноты

$$P_jP_k = \delta_{jk}P_k, \quad \sum_j P_j = 1.$$

Показать, что оператор

$$K(s) \equiv i\hbar\sum_j (dP_j/ds)\,P_j \equiv -i\hbar\sum_j P_j\,(dP_j/ds)$$

эрмитов и удовлетворяет коммутационным соотношениям (75). Показать, что справедливы тождества

$$P_jKP_j = 0 \quad (j = 1, 2, \ldots)$$
$$P_jKP_k = i\hbar P_j\,(dP_k/ds)\,P_k = -i\hbar P_j\,(dP_j/ds)\,P_k.$$

6. Пусть операторы $P_j(s)$ $(j = 1, 2, \ldots)$ те же, что и в предыдущей задаче. Показать, что производная от оператора

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)\,P_j(s),$$

где $\varepsilon_j(s)$ — дифференцируемая функция s, удовлетворяет уравнению

$$P_j\,(dH/ds)\,P_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_j)\,P_j\,(dP_k/ds)\,P_k + \delta_{jk}\,(d\varepsilon_k/ds)\,P_k.$$

Вывести отсюда, что «угловая скорость» $\alpha_{ji}(t)$, определяемая уравнением (109), выражается также соотношением

$$\alpha_{ji}(t) = \frac{-1}{\hbar\omega_{ji}(t)} \langle j \mid \frac{dH}{dt} \mid i\rangle_t \quad (j \neq i).$$

7. Однородное магнитное поле $\mathcal{H}$ заданной величины вращается с постоянной угловой скоростью α вокруг оси, составляющей угол θ с направлением магнитного поля В поле помещена бесконечно тяжелая частица со спином J. Положим $\hbar = 1$, обозначим $u(t)$ единичный вектор, параллельный магнитному полю, а $\gamma = \mu\mathcal{H}$, где μ — гиромагнитное отношение частицы. Тогда движение спина J определяется гамильтонианом $H(t) = -\gamma(Ju)$. Пусть $t = 0$ есть начальный момент времени, J_0 — компонента J вдоль $u(0)$, J_z — компонента по оси вращения поля.

Построить унитарный оператор «вращающихся осей», показать, что оператор эволюции в шредингеровском представлении дается формулой

$$U(t) = \exp(-i\alpha J_z t)\exp[i(\gamma J_0 + \alpha J_z)t].$$

Показать справедливость адиабатической теоремы для этого примера; установить непосредственным вычислением и методом § 13 критерий применимости адиабатического приближения $(\alpha \sin\theta/\gamma)^2 \ll 1$.

8. Для определенной в § 14 системы рассмотрим уравнение Шредингера при $M_J = \frac{1}{2}$. Пусть $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ — компоненты решения в определенном там представлении. Возьмем $t_0 = -\frac{1}{2}T$ и обозначим

$$T' = 2A\hbar^2 T/\mu_B \mathcal{H}_0 \ (\ll T), \quad \varkappa = 4/A\hbar T'.$$

Показать, что

$$u = y\exp(-i\varkappa\xi^2), \quad v = i(dy/d\xi)\exp(-i\varkappa\xi^2),$$

где y как функция переменной $\xi = A\hbar t/\sqrt{2}$ удовлетворяет уравнению

$$y'' - \frac{1}{2}i(\sqrt{2} + 4\varkappa\xi)y' + y = 0.$$

Если ввести $x = \xi + (\sqrt{2}/4\varkappa)$, то общее решение этого уравнения можно записать в виде

$$y = A_0 F\left(\frac{i}{4\varkappa} \mid \frac{1}{2} \mid i\varkappa x^2\right) + A_1 x F\left(\frac{1}{2} + \frac{i}{4\varkappa} \mid \frac{3}{2} \mid i\varkappa x^2\right).$$

Пусть начальное состояние есть $|0\,\frac{1}{2}\rangle$. Показать, используя асимптотику гипергеометрических функций, что вероятность $\tilde{\omega}$ того, что система останется в том же состоянии в конце времени T, дается формулой (справедливой, если $T \gg (T'/A\hbar)^{1/2}$)

$$\tilde{\omega} = \left(\frac{1-\gamma}{1+\gamma}\right)^2, \quad \gamma = \operatorname{th}\frac{\pi}{4\varkappa}.$$

Показать, что условия (119) и (120) действительно отвечают адиабатическому и быстрому переходам соответственно.

ГЛАВА XVIII

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД И СВЯЗАННЫЕ С НИМ ЗАДАЧИ

§ 1. Вариационный метод Ритца

Кроме метода ВКБ, который имеет очень узкую область применения, существуют два основных метода приближенного определения уровней энергии и волновых функций дискретного спектра: теория возмущений (глава XVI) и вариационный метод. Настоящая глава посвящена второму из этих методов.

Вариационный метод является универсальным и может быть использован во всех тех случаях, когда уравнения представимы в вариационной форме. Основа метода состоит в следующем. Искомые решения принадлежат некоторому функциональному пространству $\mathscr{F}$; произвольную функцию из этого пространства обозначим Ψ. Предположим, что решения исследуемого уравнения есть функции из $\mathscr{F}$, для которых стационарен некоторый функционал $Q[\Psi]$. Тогда уравнение эквивалентно вариационному уравнению

$$\delta Q = 0. \tag{1}$$

Вариационный метод Ритца состоит в поиске решений уравнения (1) среди функций из пространства $\mathscr{F}'$, которое у́же, чем пространство $\mathscr{F}$.

Предположим, например, что $\mathscr{F}$ — множество всех волновых функций системы. Выберем ряд конкретных волновых функций $\Phi(a, b, c)$, параметризованных некоторым числом непрерывных индексов $a, b, \ldots$. Множество этих функций $\mathscr{F}'$ представляет собой только часть $\mathscr{F}$. Величина Q, рассматриваемая как функционал от Φ, сводится к обычной функции от вариационных параметров $a, b, \ldots$, т. е.

$$q(a, b, \ldots) \equiv Q[\Phi(a, b, \ldots)].$$

Каждый набор значений $a_0, b_0, \ldots$, для которого эта функция стационарна, определяет приближенное решение $\Phi_0 \equiv \equiv \Phi(a_0, b_0, c_0, \ldots)$ уравнения (1).

Успех метода существенно зависит от выбора пространства пробных функций $\mathscr{F}'$. Пробная функция должна быть достаточно проста для проведения вычислений и в то же время

должна меняться в достаточно большой или достаточно подходящей области, чтобы полученное решение было близко к точному.

На практике стационарные значения Q имеют вполне определенный физический смысл. Одно из основных достоинств вариационного метода заключается в непосредственной и точной оценке этих значений. Ясно, что разность между $Q[\Phi_0]$ и $Q[\Psi_0]$ тем меньше, чем ближе приближенное решение Φ_0 к точному Ψ_0; более того, поскольку величина $Q[\Psi]$ стационарна в точке $\Psi = \Psi_0$, эта разность является бесконечно малой величиной более высокого порядка, чем разность между Φ_0 и Ψ_0. Таким образом, вариационный метод особенно удобен для вычисления таких величин, которые можно представить в виде стационарных значений функционалов. Именно так обстоит дело в случае уровней энергии связанных состояний. В главе XIX мы увидим также, что метод может быть использован для вычисления амплитуд рассеяния.

Вычисление уровней дискретного спектра вариационным методом приведено в разделе I этой главы. В остальных двух разделах мы рассматриваем две важные задачи, используя методы, более или менее связанные с вариационным методом: определение волновых функций сложных атомов в приближении самосогласованного поля методами Хартри и Фока — Дирака (раздел II) и адиабатическое приближение Борна — Оппенгеймера для молекул (раздел III).

Раздел I. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ДЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

§ 2. Вариационная форма задачи на собственные значения

Для определения связанных состояний вариационным методом используется функционал — среднее значение энергии. Справедлива следующая теорема [1]):

Теорема. *Пусть H — гамильтониан квантовой системы и $E[\Psi]$ — среднее значение энергии системы*

$$E[\Psi] \equiv \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \tag{2}$$

Любой собственный вектор, для которого среднее значение энергии (2) *стационарно, есть собственный вектор дискретного*

[1]) Это общий результат, относящийся к дискретному спектру эрмитовых операторов в гильбертовом пространстве. При доказательстве используется только эрмитовость оператора H.

спектра оператора H, верно и обратное. Соответствующее собственное значение равно стационарному значению функционала $E[\Psi]$.

Следует отметить, что речь здесь идет о векторах с *конечной нормой*: функциональное пространство $\mathcal{F}$ (определенное в § 1) есть гильбертово пространство динамических состояний системы. Следовательно, теорема утверждает, что собственные функции H, принадлежащие гильбертову пространству, являются решениями вариационного уравнения

$$\delta E = 0. \tag{3}$$

Заметим также, что функционал $E[\Psi]$ не зависит от нормы и фазы вектора $|\Psi\rangle$, а значит, теорема останется справедливой, если на эти величины наложить любое дополнительное условие. В частности, иногда удобно ограничить область изменения $|\Psi\rangle$ векторами с единичной нормой, как это сделано в ряде примеров этой главы.

Доказательство теоремы. Вычислим вариацию $E[\Psi]$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle\,\delta E = \delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle) - E\delta(\langle\Psi|\Psi\rangle) =$$
$$= \langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle.$$

Так как величина $\langle\Psi|\Psi\rangle$ остается конечной и не равной нулю, то уравнение (3) эквивалентно следующему:

$$\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0. \tag{4}$$

Вектор $|\delta\Psi\rangle$ есть вариация вектора $|\Psi\rangle$, а $\langle\delta\Psi|$ — вариация сопряженного к $|\Psi\rangle$ вектора. Следовательно, вариации $|\delta\Psi\rangle$ и $\langle\delta\Psi|$ не независимы. Их можно, однако, считать таковыми. Действительно, заменив $|\delta\Psi\rangle$ в уравнении (4), которое справедливо для любых бесконечно малых $|\delta\Psi\rangle$, на $i|\delta\Psi\rangle$

$$-i\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + i\langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0, \tag{4'}$$

и образовав подходящие линейные комбинации уравнений (4) и (4'), получим два эквивалентных уравнения:

$$\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle = 0, \quad \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0.$$

Они эквивалентны уравнению (4), если условиться рассматривать вариации $|\delta\Psi\rangle$ и $\langle\delta\Psi|$ как произвольные и независимые [1]).

---

[1]) Это — общее правило, которое следует из того факта, что выражение (4) линейно относительно векторов $|\delta\Psi\rangle$ и $\langle\delta\Psi|$, а соотношение между сопряженными друг другу векторами антилинейно.

Получили два уравнения:

$$(H-E)\,|\Psi\rangle=0, \quad \langle\Psi|\,(H-E)=0,$$

или

$$(H-E[\Psi])\,|\Psi\rangle=0, \tag{5а}$$

$$(H^{+}-E^{*}[\Psi])\,|\Psi\rangle=0. \tag{5б}$$

В силу эрмитовости H ($H=H^{+}$) уравнения (5а) и (5б) тождественны. Следовательно, уравнение (3) эквивалентно уравнению (5а): любой вектор $|\Psi_1\rangle$, для которого функционал E стационарен, есть собственный вектор H с собственным значением $E[\Psi_1]$.

Обратно, пусть $|\Psi_1\rangle$ — собственный вектор с конечной нормой и E_1 — соответствующее собственное значение

$$H\,|\Psi_1\rangle=E_1\,|\Psi_1\rangle.$$

Умножая это уравнение слева на $\langle\Psi_1|$, получаем

$$E_1=E[\Psi_1].$$

Следовательно, вектор $|\Psi_1\rangle$ удовлетворяет уравнению (5а), а в силу эрмитовости H и вещественности E_1 — и уравнению (5б). Отсюда заключаем, что функционал $E[\Psi]$ стационарен для $\Psi=\Psi_1$. ■

Дополним полученную теорему следующей леммой.

Лемма. *Каково бы ни было динамическое состояние системы, среднее значение ее энергии больше или равно энергии основного состояния*

$$E[\Psi]\geqslant E_0. \tag{6}$$

Для доказательства этого неравенства достаточно вычислить разность между левой и правой частями в представлении, где H — диагонален. Предположим для простоты, что спектр H чисто дискретный. Пусть $E_0, E_1, \ldots, E_n, \ldots$ — уровни энергии, расположенные в порядке их возрастания, а $P_0, P_1, \ldots, P_n, \ldots$ — проекторы на соответствующие подпространства. Используя разложение единицы, находим

$$E[\Psi]-E_0\equiv\frac{\langle\Psi\,|\,(H-E_0)\,|\,\Psi\rangle}{\langle\Psi\,|\,\Psi\rangle}=\sum_{n=1}^{\infty}(E_n-E_0)\frac{\langle\Psi\,|\,P_n\,|\,\Psi\rangle}{\langle\Psi\,|\,\Psi\rangle}.$$

Так как каждый член в этой сумме положителен или равен нулю, то и сама сумма не меньше нуля, что и доказывает неравенство (6).

§ 3. Вариационное вычисление дискретных уровней

Мы видели в § 1, что приближенное решение вариационного уравнения (3) можно получить, ограничивая область изменения векторов $|\Psi\rangle$ только частью пространства состояний. При удачном выборе этой области $\mathscr{F}'$ мы получаем некоторые собственные векторы H с хорошей точностью, а соответствующие им собственные значения — с еще лучшей точностью.

Метод становится особенно простым в том случае, *когда пробная функция линейно зависит от вариационных параметров*, т. е. когда $\mathscr{F}'$ также является векторным пространством. Тогда $\mathscr{F}'$ — подпространство $\mathscr{F}$ в обычном смысле (§ VII. 2).

Введем обозначения: P — проектор на $\mathscr{F}'$, Φ — произвольный вектор $\mathscr{F}'$, а H_P — сужение гамильтониана на $\mathscr{F}'$

$$H_P \equiv PHP. \tag{7}$$

Функционал $E[\Phi]$ (определение (2)) равен среднему значению H_P. Эрмитов оператор H_P линейно преобразует векторы из $\mathscr{F}'$ в себя и может рассматриваться как эрмитов оператор в пространстве $\mathscr{F}'$, для которого справедлива основная теорема § 2. Следовательно, вариационное уравнение

$$\delta E[\Phi] = 0 \tag{8}$$

эквивалентно уравнению на собственные значения

$$H_P\Phi = E\Phi. \tag{9}$$

Таким образом, вариационное приближение состоит в замене задачи на собственные значения оператора H на аналогичную задачу, которая *a priori* легче для решения, поскольку она определена в более узком пространстве.

Отметим аналогию с теорией возмущений (§ XVI. 8). В частности, если $\mathscr{F}'$ есть подпространство, отвечающее данному собственному значению невозмущенного гамильтониана, то вариационный метод и вычисление в первом порядке по теории возмущений дадут одинаковые уровни.

§ 4. Простой пример: атом водорода

Прежде чем обсуждать подробно вариационный метод, его достоинства и недостатки, полезно познакомиться с ним на конкретном примере вычисления основного состояния атома водорода и полученные результаты сравнить с точными ответами главы XI.

Введем обозначения:

$$a_0 = \hbar^2/me^2, \quad E_{\text{H}} = \frac{1}{2}(e^2/\hbar c)^2 mc^2, \quad \rho = r/a_0.$$

Так как мы ищем собственные состояния с фиксированным моментом импульса (lm), то пробные функции выберем в виде

$$\Phi = a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{u(\rho)}{\rho} Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Несложное вычисление дает

$$E[\Phi] = -E_{\text{H}} \frac{\int_0^\infty u^* \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right) u \, d\rho}{\int_0^\infty |u|^2 \, d\rho}.$$

Ограничимся s-состояниями $(l = m = 0)$ и вычислим стационарные значения энергии для трех различных пробных функций:

$$u_1 = \rho e^{-b\rho}, \quad u_2 = \frac{\rho}{b^2 + \rho^2}, \quad u_3 = \rho^2 e^{-b\rho}.$$

Каждая из этих функций зависит только от одного параметра b. Следовательно, $E[\Phi]$ в каждом случае сводится к функции от b, и наша задача состоит в определении минимума этой функции. Несложные вычисления приводят к результатам, собранным в табл. I. Первым приводится аналитическое выражение для нормы пробной функции $N^2 = \langle \Phi | \Phi \rangle$ как функции от b, затем среднее значение энергии, положение минимума $b_{\min}$ и его значение E_{var}. Интересно сравнить E_{var} с энергией основного состояния $E_0 = -E_{\text{H}}$ и приближенное решение Ψ_{var} с точным — Ψ_0. Для этого в табл. I приведены нормированные радиальные функции $(u/N)_{\text{var}}$, а соответствующие кривые изображены на рис. 14, их можно сравнить с точным решением $2\rho e^{-\rho}$. Для каждого из трех приближенных решений Ψ_{var} в таблице также приведены среднее значение $\langle r \rangle_{\text{var}}$ и величина $\varepsilon \equiv \equiv 1 - |\langle \Psi_0 | \Psi_{\text{var}} \rangle|^2$ (предполагается, что Ψ_0 и Ψ_{var} нормированы на единицу); величина ε служит хорошей мерой отклонения Ψ_{var} от основного состояния (она равна квадрату нормы компоненты Ψ_{var}, ортогональной Ψ_0).

Все три пробные функции, как и волновая функция основного состояния, не имеют нулей (за исключением начала координат). Поэтому естественно ожидать, что они больше походят на эту функцию, чем на волновые функции возбужденных состояний, и величина E_{var} ближе к энергии основного состояния $-E_{\text{H}}$, чем к какому-либо другому уровню (первый возбужденный уровень: $E_1 = -\frac{1}{4} E_{\text{H}}$). Для того чтобы в этом убе-

диться, мы приводим в таблице I под каждым значением E_{var} соответствующее значение отношения $(E_{var} - E_0)/(E_1 - E_0)$, которое хорошо отражает ошибку, возникающую при вычислении энергии основного состояния вариационным методом.

Таблица I

Вычисление вариационным методом основного состояния атома водорода

	1	2	3
$u(b, \rho) =$	$\rho e^{-b\rho}$	$\frac{\rho}{b^2 + \rho^2}$	$\rho^2 e^{-b\rho}$
$N^2 =$	$1/4b^3$	$\pi/4b$	$3/4b^5$
$E(b)/E_H =$	$b^2 - 2b$	$(\pi - 8b)/2\pi b^2$	$\frac{1}{3} b^2 - b$
$b_{min} =$	1	$\frac{1}{4}\pi$	$\frac{3}{2}$
$E_{var} =$	$-E_H$	$-0{,}81E_H$	$-0{,}75E_H$
$\frac{E_{var} - E_0}{E_1 - E_0} =$	0	0,25	0,33
$(u/N)_{var} =$	$2\rho e^{-\rho}$	$\rho\left[\left(\frac{1}{4}\pi\right)^2 + \rho^2\right]^{-1}$	$\frac{1}{4} 9\sqrt{2}\,\rho^2 e^{-\frac{3}{2}\rho}$
$\langle r \rangle_{var} =$	$1{,}5a_0$	∞	$1{,}66a_0$
$\varepsilon = 1 - \lvert\langle \Psi_0 \rvert \Psi_{var}\rangle\rvert^2 =$	0	0,21	0,05

Лучший результат получается с пробной функцией u_1, которая дает точную волновую функцию и точное собственное значение; отметим, что u_1 имеет то же поведение в начале координат ($\sim\rho$) и экспоненциальное убывание на бесконечности как и собственные функции s-состояний (даже для притягивающего потенциала, отличного от кулоновского, когда мы не получили бы точной волновой функции, согласие результатов было бы очень хорошим). Функция u_2 имеет правильное поведение в начале координат, но совершенно отличную от точного решения асимптотику на бесконечности, однако она дает удовлетворительное значение $E_{var} = -0{,}81\,E_H$. Функция u_3, которая имеет совершенно другое поведение в начале координат ($\sim\rho^2$) и правильное экспоненциальное убывание на бесконечности, дает более скромный результат.

Рассмотрение величин $\langle r\rangle_{\text{var}}$ и ε показывает, что в целом функция u_3 больше похожа на точное решение, чем u_2. Тот факт, что она дает худший результат для энергии, подчеркивает

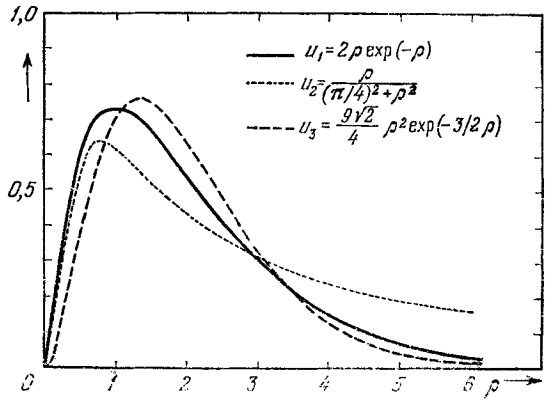


Рис. 14. Нормированные радиальные функции основного состояния атома водорода, полученные вариационным методом.

важность поведения пробной функции в начале координат при вычислении энергии, в особенности из-за притягивающего характера потенциала.

§ 5. Обсуждение. Вычисление возбужденных уровней

Вариационный метод является очень удобным и сильным методом, но в нем трудно оценить точность результатов.

Отсутствует безошибочный способ определения того, для какого уровня получено приближенное значение, какова, *a fortiori*, погрешность результата. Часто, однако, можно ответить на первый из этих вопросов, сравнивая общий вид полученной волновой функции Ψ_{var} (число нулей, поведение в начале координат и на бесконечности) с аналогичными характеристиками точного решения или по крайней мере с тем, что известно *a priori* о точном решении. Обычно выбирают пробные функции, имеющие простой аналитический вид и ограниченное число осцилляций (или нулей), так что они имеют много шансов быть близкими к волновой функции основного состояния.

Приведенные рассуждения показывают, что *вариационный метод особенно удобен для вычисления энергии основного состояния*, для которого он дает *оценку сверху* (лемма (6)). К сожалению, не существует надежного метода для оценки порядка величины ошибки (см. задачу 1). Все зависит от выбора проб-

ной функции, т. е. от выбора и расположения функциональной области $\mathscr{F}'$.

Необходимость выбора более сложных пробных функций, трудности в интерпретации результатов, в определении порядка и знака ошибок делают рискованным использование вариационного метода для вычисления возбужденных уровней. Существуют, однако, две ситуации, в которых его использование возможно.

Прежде всего, если известна волновая функция основного состояния Ψ_0, то пробную функцию Φ следует выбирать среди функций, ортогональных к Ψ_0. В этом случае значение функционала $E[\Phi]$ не меньше энергии первого возбужденного состояния E_1

$$E[\Phi] \geqslant E_1 \tag{10}$$

и вариационный метод дает верхнюю оценку для E_1 (см. задачу 2). Может случиться, что вместо точной известна приближенная волновая функция основного состояния Φ_0 (определенная, например, вариационным методом). В этом случае для вариационного вычисления E_1 используют пробные функции, ортогональные к Φ_0, при условии, что разность между Φ_0 и Ψ_0 достаточно мала, т. е. если

$$\varepsilon_0 = 1 - |\langle \Psi_0 | \Phi_0 \rangle|^2 \ll 1$$

(функции Ψ_0 и Φ_0 имеют норму 1). Стационарная функция Φ_1, которая, как мы предполагаем, имеет норму 1, не ортогональна больше Ψ_0, и неравенство (10) может быть неверным, но обязательно

$$|\langle \Phi_1 | \Psi_0 \rangle|^2 < \varepsilon_0, \tag{11}$$

откуда следует, что

$$E[\Phi_1] \geqslant E_1 - \varepsilon_0 (E_1 - E_0). \tag{12}$$

Вторая благоприятная ситуация возникает в случае, когда оператор H обладает симметрией. Предположим, например, что H инвариантен относительно вращений. Тогда собственные значения и собственные функции классифицируются посредством квантовых чисел j, m. Пусть функции с моментом импульса (jm) образуют пространство $\mathscr{E}(jm)$. Выбирая пробную функцию из $\mathscr{E}$, мы можем провести вариационное вычисление уровней (jm), а точнее — низшего из них, и вариационный метод автоматически дает оценку этого уровня сверху (задача 4).

§ 6. Основное состояние атома гелия

В этом параграфе вариационный метод применяется для вычисления энергии основного состояния атома гелия He или, в более общем случае, $(Z-2)$-кратно ионизированных атомов,

таких как Li^+, Be^{++} и т. д. Эта задача уже рассматривалась методом теории возмущений в § XVI.4, и в данном параграфе, если не оговорено противное, мы будем использовать те же обозначения.

В качестве пробной функции возьмем функцию, которую дает нулевой порядок теории возмущений

$$\Phi_a(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-(r_1+r_2)/a},$$

где a будет рассматриваться как вариационный параметр, а не как заданное значение a_0/Z.

Поскольку пробная функция имеет норму 1, среднее значение энергии равно

$$E(a) = \langle \varphi_a | H | \varphi_a \rangle = \int\int \varphi_a^* (H\varphi_a)\, d\boldsymbol{r}_1\, d\boldsymbol{r}_2.$$

Гамильтониан системы можно представить в виде

$$H = k_1 + k_2 + v_1 + v_2 + V_{12},$$

где k_i $(i = 1, 2)$ — оператор кинетической энергии i-го электрона, $v_i = Ze^2/r_i$ — взаимодействие электрона с ядром, а V_{12} — взаимодействие между электронами. Следовательно, $E(a)$ есть сумма средних значений этих пяти операторов. Вычисление этих величин значительно упрощается, поскольку волновую функцию φ_a можно представить в виде $\varphi_a = f_a(\boldsymbol{r}_1) f_a(\boldsymbol{r}_2)$, где $f_a(\boldsymbol{r})$ — собственная функция, отвечающая основному состоянию электрона в кулоновском поле заряда $Z'e$, $Z' = a_0/a$. Полная энергия такого электрона равна $-Z'^2 E_H$, среднее значение кинетической энергии $+Z'^2 E_H$, а среднее значение потенциальной энергии $-2Z'^2 E_H$ (задача XI.1). Следовательно,

$$\langle \varphi_a | k_i | \varphi_a \rangle = Z'^2 E_H,$$
$$\langle \varphi_a | v_i | \varphi_a \rangle = -2Z'^2 E_H (Z/Z') = -2ZZ' E_H.$$

Кроме того, согласно вычислениям § XVI.4 (ур. (XVI.17)—(XVI.20))

$$\langle \varphi_a | V_{12} | \varphi_a \rangle = \frac{5}{4} Z' E_H,$$

откуда

$$E(a) = 2E_H \left(Z'^2 - 2\left(Z - \frac{5}{16} \right) Z' \right).$$

Это выражение, рассматриваемое как функция a или Z', имеет минимум при

$$Z' = Z - \frac{5}{16}, \qquad (12')$$

и минимальное значение равно

$$E_{\text{var}} = -2\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 E_{\text{H}}.$$

Численные значения E_{var}, соответствующие атомам He, Li^+ и Be^{++}, приведены в таблице I в § XVI.4. Интересно сравнить их со значениями, полученными при вычислении в первом порядке по теории возмущений. Заметим, что

$$E_{\text{var}} = -2Z^2E_{\text{H}} + \frac{5}{4}ZE_{\text{H}} - \frac{25}{128}E_{\text{H}} = E_{\text{pert}} - \frac{25}{128}E_{\text{H}},$$

и, следовательно, найденное значение меньше значения, которое получается по теории возмущений, на независящую от Z величину

$$\frac{25}{128}E_{\text{H}} = 2{,}64 \text{ эв}.$$

Как и следовало ожидать, E_{var} дает лучшее приближение, которое, однако, больше экспериментального значения E_{exp}, в согласии с неравенством (6).

Полученная при этом вычислении функция имеет простой физический смысл. Она отвечает двум независимым частицам, движущимся в кулоновском поле заряда $Z'e$, который определяется формулой (12′), этот заряд меньше заряда ядра на $\frac{5}{16}e$, и разница отражает эффект экранировки, которую испытывает каждый из электронов при движении в кулоновском поле ядра из-за присутствия другого электрона.

Выбрав пробную функцию более сложной, можно получить значение E_{var}, которое еще ближе к точному собственному значению. В частности, можно взять вместо пробной функции φ_a, зависящей только от одного вариационного параметра a, произведение φ_a на полином некоторой степени от переменных r_1, r_2 и r_{12}, коэффициенты которого также рассматриваются как вариационные параметры. С увеличением сложности полинома получаемое значение E_{var} будет уменьшаться и приближаться к точному значению. Поступая таким образом, Хиллерас получил прекрасное согласие теоретического значения с экспериментальным [1]).

---

[1]) *Hylleraas.* Zeit. f. Phys. **65**, 209 (1930). Подробное изложение этого метода имеется в книге: *Е. Кондон, Т. Шортли.* Теория атомных спектров. М., ИЛ, 1949. Метод характеризуется очень быстрой сходимостью. При восьми варьируемых параметрах вычисленное значение лежит несколько ниже экспериментального, что на первый взгляд противоречит неравенству (6). В действительности, E_{exp} несколько больше собственного значения E_0, соответствующего основному состоянию H, за счет релятивистских эффектов, вклад которых можно оценить. Метод Хиллераса позволяет очень точно вычислять именно E_0, а не E_{exp}.

Раздел II. АТОМЫ ХАРТРИ И ФОКА — ДИРАКА

§ 7. Метод самосогласованного поля

Мы уже проводили общее квантово-механическое рассмотрение сложных атомов. При этом использовалось приближение независимых частиц, согласно которому каждый электрон движется независимо от других в потенциале, описывающем притяжение к ядру и эффект усредненного отталкивания от других электронов. В этом приближении волновая функция атома записывается в виде определителя Слетера, который следует выбирать как можно ближе к точному решению уравнения Шредингера для атома. Наилучшая волновая функция получается, если использовать вариационный метод, а в качестве пробной функции брать произвольный определитель Слетера Ф. Этот важный частный случай вариационного метода носит название метода самосогласованного поля. Не вдаваясь в детали вычислений, мы рассмотрим в данном разделе основные этапы этого метода [1]).

Метод используется не только в теории атомов. Важное применение он находит при рассмотрении электронов в молекуле, в твердом теле и вообще систем тождественных частиц в произвольном внешнем поле. Хотя в этом разделе речь будет идти только об атомах, приводимые ниже рассуждения справедливы и для таких более общих случаев.

§ 8. Вычисление $E[\Phi]$

Гамильтониан системы из Z электронов можно записать в виде

$$H = H_1 + H_2, \tag{13}$$

$$H_1 = \sum_{i=1}^{Z} h^{(i)}, \qquad h^{(i)} = \frac{p^{(i)2}}{2m} + V(r^{(i)}), \tag{14}$$

$$H_2 = \sum_{i<j} w^{(ij)}. \tag{15}$$

Первое слагаемое H_1 включает в себя кинетическую энергию и потенциальную энергию электронов во внешнем поле (электрическое поле ядра). Оно представляет собой сумму Z одинаковых одночастичных гамильтонианов. Второе слагаемое H_2

[1]) Метод и его практическое приложение подробно разбирается в книге: *Д. Хартри.* Расчеты атомных структур. М., ИЛ, 1960. См. также цитированную ранее книгу Кондона и Шортли.

описывает энергию взаимодействия электронов, т. е. является суммой $^1/_2 Z(Z-1)$ одинаковых слагаемых, описывающих взаимодействие каждой пары электронов; $w^{(ij)}$ — потенциал между электронами с номерами i и j. Если не учитывать силы, зависящие от спинов, то $w^{(ij)}$ равен потенциалу электростатического отталкивания

$$w^{(ij)} = e^2/r_{ij} \qquad (r_{ij} \equiv |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|). \tag{16}$$

Дальнейшее рассмотрение не зависит от конкретного вида $w^{(ij)}$, мы будем предполагать только, что $w^{(ij)}$ есть функция динамических переменных электронов с номерами i и j, симметричная относительно перестановки (ij).

Поскольку $E[\Phi]$ не зависит от нормировки пробной функции Φ, последнюю всегда можно считать нормированной на единицу. Используя обозначения главы XIV, запишем ее в виде

$$|\Phi\rangle \equiv (Z!)^{\frac{1}{2}} A |\hat{\Phi}\rangle, \tag{17}$$

где A — определенный уравнением (XIV.26) антисимметризатор

$$A \equiv \frac{1}{Z!} \sum_P (-1)^p P, \tag{18}$$

а $|\hat{\Phi}\rangle$ — тензорное произведение Z произвольных, ортонормированных одночастичных кет-векторов

$$|\hat{\Phi}\rangle \equiv |\alpha\rangle^{(1)} |\beta\rangle^{(2)} \ldots |\zeta\rangle^{(Z)} \equiv |\alpha^{(1)}\beta^{(2)} \ldots \zeta^{(Z)}\rangle, \tag{19}$$

$$\langle\lambda|\mu\rangle = \delta_{\lambda\mu} \qquad (\lambda, \mu = \alpha, \beta, \ldots, \zeta). \tag{20}$$

В этом случае условие нормировки выполняется автоматически

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = 1. \tag{21}$$

Величина $E[\Phi]$ есть сумма средних значений операторов H_1 и H_2. Их вычисление упрощается в силу того факта, что H_1 и H_2 инвариантны относительно перестановок, коммутируют с A, а оператор A — проектор ($A^2 = A$).

Для среднего значения H_1 последовательно находим

$$\langle H_1\rangle \equiv \langle\Phi|H_1|\Phi\rangle = Z!\langle\hat{\Phi}|H_1 A|\hat{\Phi}\rangle =$$

$$= \sum_{i=1}^{Z} \sum_P (-1)^p \langle\hat{\Phi}|h^{(i)}P|\hat{\Phi}\rangle = \sum_{i=1}^{Z} \langle\hat{\Phi}|h^{(i)}|\hat{\Phi}\rangle.$$

Заменяя вектор $|\hat{\Phi}\rangle$ его определением (19), получаем

$$\langle H_1\rangle = \sum_\lambda \langle\lambda|h|\lambda\rangle \qquad (\lambda = \alpha, \beta, \ldots, \zeta). \tag{22}$$

Таким образом, $\langle H_1\rangle$ есть сумма средних значений одночастичного гамильтониана h по Z одночастичным квантовым состояниям, занятым электронами.

Подобным образом $\langle H_2\rangle$ можно представить в виде суммы матричных элементов оператора w между двухэлектронными состояниями. Последовательно имеем

$$\langle H_2\rangle \equiv \langle \Phi | H_2 | \Phi\rangle = Z! \langle \hat{\Phi} | H_2 A | \hat{\Phi}\rangle = \\ = \sum_{i<j} \sum_P (-1)^p \langle \hat{\Phi} | w^{(ij)} P | \hat{\Phi}\rangle = \sum_{i<j} \langle \hat{\Phi} | w^{(ij)} (1 - P_{(ij)}) | \hat{\Phi}\rangle,$$

т. е.

$$\langle H_2\rangle = \sum{}' (\langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)} | w^{(12)} | \lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle - \langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)} | w^{(12)} | \mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle), \quad (23)$$

где суммирование происходит по всем $^1/_2 Z(Z-1)$ парам одночастичных состояний λ, μ, которые можно образовать из состояний $\alpha, \beta, \ldots, \zeta$. Первое слагаемое в скобках представляет собой среднее значение энергии взаимодействия в состоянии $|\lambda^{(1)}, \mu^{(2)}\rangle$, в котором электрон с номером 1 находится в состоянии λ, а второй электрон — в состоянии μ; второе слагаемое представляет собой обменный член, т. е. матричный элемент оператора w между состояниями $|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle$ и $|\mu^{(1)}, \lambda^{(2)}\rangle$. (Отметим, что это слагаемое вещественно и

$$\langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)} | w^{(12)} | \mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle = \langle \mu^{(1)}\lambda^{(2)} | w^{(12)} | \lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle.$$

Это свойство следует из эрмитовости $w^{(12)}$ и его инвариантности относительно перестановки (12).) Среднее $\langle H_2\rangle$ можно также записать в виде

$$\langle H_2\rangle = \frac{1}{2} \sum_\lambda \sum_\mu (\langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)} | w^{(12)} | \lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle - \\ - \langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)} | w^{(12)} | \mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle) \qquad (\lambda, \mu = \alpha, \beta, \ldots, \zeta). \quad (24)$$

Тем самым, для $E[\Phi]$ имеем

$$E[\Phi] = \langle H_1\rangle + \langle H_2\rangle, \quad (25)$$

где $\langle H_1\rangle$ и $\langle H_2\rangle$ даются формулами (22) и (24).

§ 9. Уравнения Фока — Дирака

При вариационном решении уравнения Шредингера в приближении самосогласованного поля функционал $E[\Phi]$ стационарен по отношению к Z ортонормированным векторам $|\lambda\rangle (\lambda = \alpha, \beta, \ldots, \zeta)$. Стационарность E при вариации этих векторов, которые удовлетворяют Z^2 условиям (20), эквивалентна существованию Z^2 постоянных $\varepsilon_{\lambda\mu}$ $(\lambda, \mu = \alpha, \beta, \ldots, \zeta)$ (метод мно-

жителей Лагранжа) таких, что выполнено вариационное уравнение

$$\delta E - \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \varepsilon_{\lambda\mu} \delta \langle \mu | \lambda \rangle = 0. \tag{26}$$

Постоянные $\varepsilon_{\lambda\mu}$ можно рассматривать как элементы некоторой $Z \times Z$ матрицы ε. Эта матрица эрмитова, поскольку в силу вещественности E вариация δE также вещественна, и, вычитая из уравнения (26) комплексно сопряженное уравнение, получаем

$$\sum_{\lambda} \sum_{\mu} (\varepsilon_{\lambda\mu} - \varepsilon^*_{\mu\lambda}) \delta \langle \mu | \lambda \rangle = 0,$$

откуда следует, что

$$\varepsilon_{\lambda\mu} = \varepsilon^*_{\mu\lambda}.$$

Z векторов $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, ..., $|\zeta\rangle$ образуют ортонормированный базис некоторого подпространства $\mathscr{E}_\Phi$ пространства одночастичных состояний. Замена базиса в этом подпространстве приводит к умножению вектора $|\Phi\rangle$ на фазовый множитель. Действительно, пусть S — унитарная матрица $Z \times Z$, определяющая переход к новому базису $|\alpha'\rangle$, $|\beta'\rangle$, ..., $|\zeta'\rangle$, и

$$|\lambda'\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle S_{\lambda\lambda'}.$$

В силу хорошо известного свойства произведения детерминантов определитель Слетера Z новых векторов равен произведению определителя Слетера Z старых векторов на $\det S$. Следовательно,

$$|\Phi'\rangle = (\det S) |\Phi\rangle,$$

а поскольку матрица S унитарна, то $|\det S| = 1$. Отсюда мы заключаем, что функционал $E[\Phi]$ инвариантен относительно изменения базиса, а вариационное уравнение (26) определяет набор $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, ..., $|\zeta\rangle$ с точностью до такого изменения.

Используя уравнение (26), легко показать, что справедливо аналогичное уравнение

$$\delta E - \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \varepsilon'_{\lambda\mu} \delta \langle \mu' | \lambda' \rangle = 0,$$

где матрица ε' связана с ε преобразованием подобия

$$\varepsilon'_{\lambda\mu} = (S^+ \varepsilon S)_{\lambda\mu}.$$

В частности, матрицу S можно выбрать таким образом, чтобы матрица ε' была диагональной. Так как вариационная задача не зависит от выбора базиса, мы будем считать в даль-

нейшем матрицу диагональной. Тогда вариационное уравнение (26) примет вид

$$\delta E - \sum_{\lambda} e_\lambda \delta \langle \lambda | \lambda \rangle = 0. \qquad (26')$$

Используя уравнения (22), (24) и (25), несложно сосчитать δE, после чего левая часть уравнения (26′) становится однородной линейной комбинацией $2Z$ вариаций $\langle \delta\lambda |$ и $|\delta\lambda\rangle$ ($\lambda = \alpha, \beta, \ldots, \zeta$). Потребовав, чтобы она обращалась в нуль при любых вариациях, которые рассматриваются как независимые (см. примечание на стр. 256), и учитывая эрмитовость гамильтониана H, получаем (не приводя здесь детальных вычислений) Z уравнений для Z ортонормированных векторов $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, ..., $|\zeta\rangle$, а именно

$$h^{(1)} |\lambda\rangle^{(1)} + \sum_{\mu}{}^{(2)} \langle \mu | w^{(12)} | \mu \rangle^{(2)} | \lambda \rangle^{(1)} - \\ - \sum_{\mu}{}^{(2)} \langle \mu | w^{(12)} | \lambda \rangle^{(2)} | \mu \rangle^{(1)} = e_\lambda |\lambda\rangle^{(1)} \quad (\lambda = \alpha, \beta, \ldots, \zeta). \qquad (I)$$

Отметим отсутствие множителя $\frac{1}{2}$ перед суммами в левой части. Умножив скалярно обе части на ${}^{(1)}\langle\lambda|$ и просуммировав по λ, находим

$$\sum_{\lambda} e_\lambda = \langle H_1 \rangle + 2\langle H_2 \rangle = E[\Phi] + \langle H_2 \rangle. \qquad (27)$$

К обсуждению этого соотношения мы вернемся в дальнейшем.

Обычно используют представление кет-векторов их волновыми функциями

$$u_\lambda(q) \equiv \langle q | \lambda \rangle,$$

где $q \equiv (r, m_s)$ обозначает пространственные и спиновые координаты.

Удобно ввести «электронную плотность»

$$\rho(q, q') \equiv \langle q | \rho | q' \rangle = \sum_{\mu} u_\mu(q)\, u_\mu^*(q'). \qquad (28)$$

Это — матричное представление проектора на определенное выше пространство $\mathscr{E}_\Phi$

$$\rho = \sum_{\mu} |\mu\rangle \langle \mu|.$$

Диагональные элементы

$$\rho(q) \equiv \rho(q, q) = \sum_{\mu} |u_\mu(q)|^2 \qquad (29)$$

представляют собой плотность вероятности найти электрон в точке q.

Взаимодействие $w^{(ij)}$ является некоторой вещественной, симметричной функцией переменных $q^{(i)}$, $q^{(j)}$, которую в дальнейшем мы будем обозначать $w(q^{(i)}, q^{(j)})$. Введем следующие обозначения:

$$W_{\text{exc}}(q, q') = \rho(q, q')\, w(q, q') \tag{30}$$

$$W(q) = \int \rho(q')\, w(q, q')\, dq', \tag{31}$$

где символ $\int dq'$ означает интегрирование по пространственным координатам и суммирование по спиновым переменным. С учетом этих обозначений уравнения (I) принимают вид интегро-дифференциальных уравнений

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q)\right] u_\lambda(q) + W(q)\, u_\lambda(q) - \int W_{\text{exc}}(q, q')\, u_\lambda(q')\, dq' = $$

$$= e_\lambda u_\lambda(q) \qquad (\lambda = \alpha, \beta, \ldots, \zeta). \tag{II}$$

Это *интегро-дифференциальные уравнения Фока — Дирака.*

Решать такие уравнения можно методом итераций. Используя приближенное значение ρ_0 для плотности и подставляя его в уравнения (30) и (31), получаем приближенные значения для величин W и W_{exc}. При известных величинах W и W_{exc} уравнения (II) становятся уравнениями на собственные значения, первые Z решений которых $-u_\alpha^{(1)}, \ldots, u_\zeta^{(1)}$ — дают новое значение ρ_1 для плотности. Используя ρ_1 и повторяя предыдущие операции, получаем новое значение — ρ_2 и т. д. Если последовательность $\rho_0, \rho_1, \rho_2, \ldots$, сходится, то она стремится к точному решению. Однако обсуждать вопросы сходимости мы здесь не будем. Отметим только, что скорость сходимости зависит от выбора ρ_0.

§ 10. Обсуждение результатов

Каждое из уравнений (II) напоминает уравнение Шредингера, определяющее одно из Z одночастичных состояний, в которых находятся Z электронов атома. Однако эти уравнения не являются в действительности настоящими уравнениями на собственные значения, поскольку операторы W и W_{exc} зависят от электронной плотности и, следовательно, собственные функции $u_\alpha, u_\beta, \ldots, u_\zeta$ входят в определение соответствующего гамильтониана. Тем не менее, поучительно рассмотреть этот одночастичный гамильтониан и попытаться придать физический смысл различным слагаемым в этом гамильтониане.

С этой целью введем обозначение для плотности электронов в $(Z-1)$ состояниях, отличных от состояния λ:

$$\rho^{(\lambda)} \equiv \sum_{\mu \neq \lambda} |\mu\rangle\langle\mu| \equiv \rho - |\lambda\rangle\langle\lambda|, \quad \rho^{(\lambda)}(q, q') \equiv \rho(q, q') - u_\lambda(q)\, u_\lambda^*(q'),$$

а выражения, получающиеся заменой ρ на $\rho^{(\lambda)}$ в уравнениях (30) и (31), обозначим $W_{\text{exc}}^{(\lambda)}$ и $W^{(\lambda)}$. Введем также усредненный потенциал $X^{(\lambda)}$, создаваемый электроном в состоянии $|\lambda\rangle$:

$$X^{(\lambda)}(q) = \int |u_\lambda(q')|^2 w(q, q')\, dq'. \tag{32}$$

$W^{(\lambda)}$ есть усредненный потенциал, создаваемый электронами, находящимися в остальных $(Z-1)$ состояниях, а усредненный потенциал W, создаваемый всеми электронами, равен

$$W(q) = W^{(\lambda)}(q) + X^{(\lambda)}(q).$$

Теперь можно записать уравнение системы (II), относящееся к состоянию λ, следующим образом:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q)\right] u_\lambda(q) + W^{(\lambda)}(q)\, u_\lambda(q) - \\ - \int W_{\text{exc}}^{(\lambda)}(q, q')\, u_\lambda(q')\, dq' = e_\lambda u_\lambda(q) \quad (\lambda = \alpha, \beta, \ldots, \zeta), \tag{III}$$

поскольку $W^{(\lambda)}(q)\, u_\lambda(q)$ отличается от $W(q)\, u_\lambda(q)$ на слагаемое «собственной энергии» $X^{(\lambda)}(q)\, u_\lambda(q)$, а

$$\int W_{\text{exc}}^{(\lambda)}(q, q')\, u_\lambda(q')\, dq' = \int W_{\text{exc}}(q, q')\, u_\lambda(q')\, dq' - X^{(\lambda)}(q)\, u_\lambda(q).$$

Легко дать интерпретацию полученной форме (III) «уравнения Шредингера» для электрона в состоянии λ. Гамильтониан представляет собой энергию электрона в поле, состоящем из поля ядра и усредненного поля остальных электронов. Гамильтониан состоит из четырех слагаемых: кинетической энергии $-\hbar^2\Delta/2m$, потенциала ядра $V(q)$, усредненного потенциала $(Z-1)$ электронов $W^{(\lambda)}(q)$ и четвертого слагаемого, представляющего обменные эффекты между состоянием λ и остальными $(Z-1)$ занятыми состояниями. Мы видим, что *обменные эффекты* ведут к нелокальному потенциалу, определяемому ядром $W_{\text{exc}}^{(\lambda)}(q, q')$.

Данная интерпретация предполагает, что собственное значение e_λ есть энергия электрона в состоянии λ. Уравнения Фока — Дирака дают Z величин $e_\alpha, e_\beta, \ldots, e_\zeta$, которые с хорошей степенью точности равны *энергиям ионизации* Z электронов атома. Однако, складывая эти энергии, мы не получим полной энергии системы Z электронов. Складывая отдельные энергии, мы правильно учитываем кинетическую энергию каждого электрона и энергию его взаимодействия с ядром, но дважды учитываем энергию взаимодействия электронов друг с другом.

Следовательно, для получения полной энергии из результата нужно вычесть усредненную величину межэлектронного взаимодействия, т. е. $\langle H_2 \rangle$. Это утверждение уже было получено нами ранее (ур. (27)).

§ 11. Уравнения Хартри

Если в системе (III) пренебречь обменными слагаемыми, то мы получим значительно более простую систему уравнений

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q) + W^{(\lambda)}(q)\right] u_\lambda(q) = e_\lambda u_\lambda(q) \qquad (\lambda = \alpha, \beta, \ldots, \zeta). \tag{IV}$$

Эти уравнения были предложены Хартри на основе только интуитивных соображений. Они могут быть также получены вариационным методом, если в качестве пробной функции использовать простое произведение одночастичных состояний, такое как $|\widehat{\Phi}\rangle$ в формуле (19), а не антисимметризованное произведение $|\Phi\rangle$, формула (17)[1]).

Систему уравнений Хартри, так же как и систему Фока — Дирака, можно решать методом итераций. Благодаря отсутствию обменных членов, вычисления здесь значительно короче. Однако эта система менее симметрична по сравнению с предыдущей, поскольку гамильтониан Хартри $h + W^{(\lambda)}$ не один и тот же для различных одночастичных состояний. Как следствие, собственные функции Z уравнений Хартри не ортогональны друг другу, что ведет к ряду трудностей при использовании этого метода, на которых мы здесь не останавливаемся.

Раздел III. СТРУКТУРА МОЛЕКУЛ

§ 12. Общие понятия. Разделение движения ядер и электронов

Молекула, представляя собой связанное состояние атомов, состоит из нескольких атомных ядер и движущихся в поле этих ядер электронов. Определение стационарных состояний столь сложной системы является очень трудной задачей. Однако существует некоторое упрощающее обстоятельство: *масса электронов много меньше массы атомных ядер*, в то время как на них действуют силы одного порядка. Как следствие этого, ядра движутся значительно медленнее электронов, и с хорошей

[1]) Это, однако, не является последовательным выводом этих уравнений, поскольку в отличие от векторов $|\Phi\rangle$, векторы $|\widehat{\Phi}\rangle$ не принадлежат пространству состояний системы.

степенью точности движения электронов и ядер можно рассматривать независимо. Действительно, в первом приближении ядра по отношению к электронам можно считать фиксированными силовыми центрами, и динамическое состояние есть состояние системы электронов в поле фиксированных ядер. Поскольку последние движутся достаточно медленно, динамическое состояние электронов адиабатически меняется в соответствии с изменением создаваемого ядрами потенциала (см. главу XVIII, раздел II). И наоборот, поскольку за время, необходимое для заметных смещений ядер, электроны успевают совершить много оборотов, ядра подвержены только некоторому усредненному влиянию со стороны электронов. С хорошей степенью точности движения ядер можно описать, заменив их взаимодействие с электронами его значением, усредненным по нескольким электронным оборотам. Применение такого способа приводит к уравнению Шредингера, в котором полностью отсутствуют переменные, описывающие электроны. Приближение, лежащее в основе этого метода разделения переменных, называется *адиабатическим приближением*.

Цель данного раздела — дать общее представление о методе и обсудить границы его применимости. Прежде чем приступить к изложению, мы закончим полуклассический анализ движения ядер и оценим вклад различных эффектов.

Потенциал в уравнении Шредингера для ядер зависит только от расстояний между ядрами. Коль скоро молекула существует, этот потенциал должен иметь минимум для некоторых вполне определенных конечных значений межядерных расстояний. Этот минимум соответствует точке устойчивого равновесия системы, и относительно этой конфигурации ядра могут совершать малые колебания. На внутренние *колебания* ядер может накладываться *поступательное движение* и *вращение* системы как целого. Поступательное движение можно полностью отделить от других движений, вводя центр масс системы, который движется, как свободная частица. В дальнейшем мы будем предполагать, что такое разделение выполнено, и будем рассматривать только колебательное и вращательное движения ядер.

Вводя обозначение m для массы электрона, а M — для величины порядка ядерных масс, и обозначая среднее расстояние между ядрами в молекуле через a, имеем [1])

$$a \approx 10^{-8}\ см, \qquad m/M \approx 10^{-3} - 10^{-5}. \tag{33}$$

Молекула имеет линейные размеры порядка a, что дает порядок величины амплитуды движения электронов. В силу со-

[1]) Отношение масс имеет наибольшее значение для молекулы водорода $(m/M)_{H_2} \approx 0{,}5 \cdot 10^{-3}$.

отношения неопределенности импульс электронов имеет порядок $\hbar/a$, что соответствует кинетической энергии порядка $\hbar^2/ma^2$. Эта кинетическая энергия равна по порядку величины энергии связи основного состояния электронов и расстоянию между энергетическими уровнями электронов

$$\varepsilon_{el} \approx \hbar^2/ma^2 \tag{34}$$

(ср. это с оценкой из § XI.3).

Что касается движения ядер, то рассмотрим вначале их вращение. Момент инерции системы имеет порядок Ma^2. Поскольку квадрат момента импульса изменяется на величину порядка $\hbar^2$, вращательная энергия будет меняться на величину порядка

$$\varepsilon_{rot} \approx \hbar^2/Ma^2. \tag{35}$$

В первом приближении колебания ядер можно рассматривать как гармонические с квантованной энергией $\varepsilon_{vib} = \hbar\omega$. Примем за нулевой уровень потенциальной энергии ее значение для устойчивой равновесной конфигурации ядер. Если в этом случае одно из ядер отвести на расстояние a, то система приобретет потенциальную энергию $\frac{1}{2} M\omega^2a^2$. Поскольку это приведет практически к полному отделению одного из атомов от молекулы и, следовательно, к увеличению энергии на величину порядка ε_{el}, то мы имеем

$$M\omega^2a^2 \approx \hbar^2/ma^2,$$

откуда

$$\varepsilon_{vib} \approx \hbar^2/(mM)^{\frac{1}{2}}a^2. \tag{36}$$

Сравнивая выражения (34) — (36), получаем

$$\varepsilon_{rot} \ll \varepsilon_{vib} \ll \varepsilon_{el}.$$

Если следовать более строгому подходу Борна и Оппенгеймера [1]) и ввести параметр

$$\varkappa = (m/M)^{\frac{1}{4}}, \tag{37}$$

то получим

$$\varepsilon_{rot} \approx \varkappa^2\varepsilon_{vib} \approx \varkappa^4\varepsilon_{el}. \tag{38}$$

Расстояние между уровнями ε связано с классической частотой $\varepsilon/\hbar$. Следовательно, мы можем заключить, что движение электронов значительно быстрее, чем колебательное движение

[1]) *M. Born, J. R. Oppenheimer.* Ann. der Phys. **84**, 457 (1927); о первоначальном методе Борна и Оппенгеймера см. § 16.

ядер, которое, в свою очередь, является более быстрым по сравнению с вращательным движением всей системы, в согласии с замечаниями, которые были сделаны в начале параграфа. Отношение частот этих движений имеет порядок $\varkappa^2$, т. е. равно приблизительно 0,01: за время одного оборота всей молекулы ядра успевают совершить примерно 100 колебаний около их положения равновесия, а электроны — приблизительно 10000 оборотов.

§ 13. Движение электронов в поле фиксированных ядер

Основываясь на полуклассических рассуждениях предыдущего параграфа, рассмотрим задачу определения стационарных состояний молекулы. Поскольку наша цель — дать скорее общее представление о методе, нежели его детальное изложение, то мы без колебаний будем принимать упрощающие предположения, которые не влияют на сущность метода. В частности, электроны и ядра мы будем рассматривать как бесспиновые частицы.

Степени свободы электронов и ядер будем параметризовать индексами i и j соответственно. Координаты электронов и ядер обозначим x_i и X_j, а массу ядра с координатой X_j обозначим M_j. Обозначим кинетическую энергию электронов T_e, кинетическую энергию ядер T_N, а потенциал взаимодействия различных частиц в молекуле V. Гамильтониан молекулы H состоит из трех слагаемых

$$H = T_e + T_N + V, \tag{39}$$

где

$$T_N = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j}\frac{\partial^2}{\partial X_j^2}, \qquad T_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}, \tag{39'}$$

а $V \equiv V(x, X)$ — некоторая функция, зависящая от координат электронов и ядер, она равна сумме кулоновских потенциалов каждой пары частиц системы.

Рассмотрим упрощенный гамильтониан

$$H^{(0)} = T_e + V, \tag{40}$$

который получается из выражения (39) отбрасыванием кинетической энергии ядер. Он представляет собой гамильтониан системы в пределе $M_j \to \infty$, и его стационарные состояния есть состояния системы электронов в поле фиксированных ядер. Действительно, поскольку $H^{(0)}$ не содержит производных по X_j, то

$$[X_j, H^{(0)}] = 0,$$

и, следовательно, операторы $H^{(0)}$ и X_j можно диагонализовать

одновременно. Другими словами, решая задачу на собственные значения оператора $H^{(0)}$, можно считать координаты ядер определенными фиксированными величинами X_j'. Заданный набор величин X_j' обозначим символом X'. Каждому набору X' отвечает набор собственных значений $W_n(X')$ оператора $H^{(0)}$, которые параметризуются квантовым числом n. При заданных n и X' существует один или несколько линейно независимых собственных векторов, которые в последнем случае следует параметризовать с помощью дополнительного индекса, например, s. Таким образом, уравнение Шредингера для $H^{(0)}$ имеет вид

$$H^{(0)}\,|nsX'\rangle = W_n(X')\,|nsX'\rangle. \tag{41}$$

В $\{xX\}$-представлении собственный вектор описывается волновой функцией

$$\varphi_{ns}(x, X')\,\delta(X - X'), \tag{42}$$

где функции φ есть решения уравнения Шредингера

$$[T_e + V(x, X')]\,\varphi_{ns}(x, X') = W_n(X')\,\varphi_{ns}(x, X'). \tag{43}$$

В уравнении (43) X' играет роль параметра, т. е. мы имеем уравнение Шредингера для электронов молекулы, когда положения ядер фиксированы в X'. Каждому решению этого уравнения соответствует собственная функция оператора $H^{(0)}$ вида (42), а все решения уравнения (43) при всех возможных значениях X' образуют полный набор собственных функций $H^{(0)}$. Для дальнейшего важно условие нормировки, и мы всегда будем брать ортонормированные собственные функции, что будет автоматически выполняться, если $\varphi_{ns}(x, X')$, рассматриваемые как функции только переменных x, имеют норму 1.

Задача определения собственных значений (43) аналогична задаче определения стационарных состояний атома и может быть решена теми же методами, например, методом самосогласованного поля. Однако в данном случае имеется несколько силовых центров, что уменьшает свойства симметрии этой задачи по сравнению с аналогичной задачей для атома.

Обсудим кратко вопросы, связанные с симметрией [1]). Потенциал $V(x, X)$ инвариантен относительно трансляций, вращений и отражений системы как целого, он инвариантен также относительно обращения времени и перестановки тождественных частиц. Допустим теперь, что положения ядер фиксированы в X'. Тогда свойствами симметрии потенциала $V(x, X')$, рассматриваемого как функция только переменных x, будут те

[1]) Общее изложение свойств симметрии электронных волновых функций молекул содержится в книге: *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.* Квантовая механика, М., Наука, 1963.

из перечисленных выше свойств, которые оставляют неизменной конфигурацию ядер X'. Так, для двухатомной молекулы ClH потенциал $V(x, X')$ инвариантен относительно вращений вокруг оси, проходящей через ядра хлора и водорода, и относительно отражений в плоскостях, проходящих через эту ось. Вместе с инвариантностью относительно обращения времени это все симметрии, которыми обладает в данном случае потенциал. Для достаточно сложных молекул потенциал инвариантен только относительно обращения времени. Как легко видеть, свойства инвариантности оператора $H^{(0)}$, действующего только на функции от x, те же, что и для потенциала $V(x, X')$. С этими свойствами симметрии связано вырождение уровня $W_n(X')$ (см. главу XV).

Чтобы устранить сложности, связанные с вырождением, будем предполагать, что $V(x, X')$ инвариантен только относительно обращения времени. Тогда, поскольку речь идет о молекуле (а не о свободном радикале), число электронов четно и имеет место первый из случаев, обсуждавшихся в § XV.21. Предполагая дополнительно, что отсутствует случайное вырождение, мы получаем невырожденное собственное значение $W_n(X')$ и при подходящем выборе фазы вещественную собственную функцию $\varphi_n(x, X')$.

В заключение этого параграфа сделаем два замечания.

Рассматриваемый как оператор, действующий только на переменные x, $H^{(0)}$ непрерывно зависит от X' как от параметра, так же как его собственные значения и собственные функции, т. е. при заданном n, $W_n(X')$ и $\varphi_n(x, X')$ — непрерывные функции от X'.

Рассматриваемый как оператор, который действует в пространстве функций от всех переменных, $H^{(0)}$ инвариантен по отношению ко всем преобразованиям, которые были упомянуты выше в связи с $V(x, X)$. Следовательно, любой вектор, который получается из $|nX'\rangle$ при действии одного из таких преобразований, является собственным для $H^{(0)}$ и соответствует тому же собственному значению $W_n(X')$. Другими словами, $W_n(X')$ не меняется при действии этих преобразований на X'. В частности, $W_n(X')$ зависит только от расстояний между ядрами, точнее, от той геометрической фигуры, которую образуют ядра, и не меняется при сдвигах (трансляциях и поворотах) или при замене этой фигуры на зеркальную (отражение).

§ 14. Адиабатическое приближение

В предыдущем параграфе мы рассматривали стационарные состояния электронов, когда положение ядер молекулы считалось фиксированным. Предположим теперь, что ядра медленно

движутся согласно некоторому закону $X'(t)$. Если это движение достаточно медленное, то динамическое состояние электронов будет адиабатически меняться в соответствии с изменениями потенциала, в котором эти электроны находятся. Так, если в момент времени t_0 они находились в состоянии $(n, X'(t_0))$, отвечающем уровню энергии $W_n(X'(t_0))$, т. е. состояние описывалось волновой функцией $\varphi_n(x, X'(t_0))$, то в момент времени t электроны будут находиться в состоянии $(n, X'(t))$, которое получается из $(n, X'(t_0))$ по непрерывности при фиксированном n.

Условия применимости этого приближения уже обсуждались нами в § XVII. 13 (см. критерий (XVII. 14)). Вероятность найти электроны в состоянии, отличном от (n, X'), дается формулой

$$\eta_n \approx \left|\frac{\alpha_n}{\omega_n}\right|^2, \tag{44}$$

где α_n — «угловая скорость» вектора $\varphi_n(x, X')$, а ω_1 — минимальная боровская частота, связанная с уровнем $W_n(X')$.

Для оценки этой величины используем полуклассические рассуждения из § 12. Расстояние между электронными уровнями дается формулой (34), откуда получаем

$$\omega_n \approx \varepsilon_{el}/\hbar \approx \hbar/ma^2. \tag{45}$$

Прежде чем вычислять α_n, оценим норму $\partial\varphi_n/\partial X'_j$, считая функцию φ_n вещественной и нормированной на 1. Мы знаем, что для отделения атома от молекулы необходимо соответствующее ядро переместить на расстояние порядка a от его положения равновесия, т. е. необходимо изменить координату X' на $\Delta X'_j \approx a$, чтобы функция $\varphi_n(x, X')$ перешла в функцию, ортогональную исходной. Следовательно, $\partial\varphi_n/\partial X_j$ приблизительно равна этой новой функции, поделенной на a, и имеет норму порядка $1/a^2$

$$\int \left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_j}\right)^2 dx \approx \frac{1}{a^2}. \tag{46}$$

По определению α_n^2 равна норме (вещественной) функции $d\varphi_n/dt$. Если $v_j = dX'_j/dt$ — скорость изменения X'_j, то α_n^2 равна норме функции $\sum_j v_j (\partial\varphi_n/\partial X_j)$ и имеет порядок

$$\alpha_n^2 \approx \frac{1}{a^2}\sum_j v_j^2.$$

Если кинетическую энергию ядра обозначить t_N, то получим

$$\alpha_n^2 \approx \frac{t_N}{Ma^2}. \tag{47}$$

Подставляя (45) и (47) в (44), находим

$$\eta_n \approx \varkappa^4 \frac{t_N}{\varepsilon_{el}}. \tag{48}$$

Приведенный полуклассический анализ может служить основой при отыскании стационарных состояний молекулы. Рассмотрим задачу на собственные значения гамильтониана H. В силу равенств (39) и (40) имеем

$$H = H^{(0)} + T_N. \tag{49}$$

Если членом кинетической энергии ядер T_N можно было бы пренебречь, то гамильтониан молекулы был бы равен $H^{(0)}$ и каждое стационарное состояние $|nX'\rangle$ соответствовало бы определенному электронному квантовому числу n и определенной конфигурации ядер X'. Положения ядер X' оставались бы фиксированными, а движение электронов описывалось бы волновой функцией $\varphi_n(x, X')$. Слагаемое T_N связывает собственные векторы $H^{(0)}$, отвечающие соседним конфигурациям X'.

В адиабатическом приближении связью между векторами с различными электронными квантовыми числами пренебрегают и считают n хорошим квантовым числом

$$n \approx \text{const}. \tag{50}$$

В этом случае собственные векторы H являются линейными комбинациями векторов $|nX'\rangle$ с определенным значением n и, следовательно, имеют вид

$$\int |nX'\rangle \psi(X')\, dX', \tag{51}$$

где $\psi(X')$ — произвольная функция X'. В $\{x, X\}$-представлении таким векторам соответствуют волновые функции вида

$$\Phi_n(x, X) \equiv \varphi_n(x, X)\, \psi(X). \tag{52}$$

Собственные функции гамильтониана H в этом приближении можно получить, *используя вариационный метод и функции* $\Phi_n(x, X)$ *в качестве пробных функций*. При этом пробная функция варьируется в подпространстве пространства векторов состояния, а именно, в пространстве $\mathscr{E}_n$ векторов вида (51). Как известно (§ 3), в этом случае мы получаем уравнение на собственные значения в этом подпространстве (ур. (9)), а в данной ситуации — уравнение Шредингера для неизвестной функции $\psi(X)$. Гамильтониан этого уравнения, который мы обозначим H_n, равен проекции H на $\mathscr{E}_n$. Он действует только на динамические переменные ядер. Собственные значения H_n представляют собой уровни энергии молекулы относительно электронного квантового числа n.

Полученную при этом погрешность можно оценить, используя рассуждения, которые были приведены в начале этого параграфа. Пусть Φ_n — некоторое из приближенных решений, а Ψ_n — соответствующее точное решение. Оба решения предполагаются нормированными на единицу. Разность $\delta\Psi = \Psi_n - \Phi_n$ описывает отклонение точного решения от адиабатического предела. Этот вектор лежит в основном вне подпространства $\mathscr{E}_n$ и имеет норму, которая равна определенной выше величине η_n. Учитывая приближенное равенство (48), получаем

$$\int\int |\delta\Psi|^2 dx\, dX \simeq \varkappa^4 \left\langle \frac{T_N}{\varepsilon_{el}} \right\rangle \approx \varkappa^4 \frac{\varepsilon_{vib}}{\varepsilon_{el}} \approx \varkappa^6.$$

Другими словами, имеем

$$\delta\Psi \approx \varkappa^3 \Phi', \tag{53}$$

где Φ' — функция, ортогональная подпространству $\mathscr{E}_n$, с нормой 1. Поскольку функционал

$$E[\Psi] \equiv \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

стационарен на решении Ψ_n, вычисление энергии с функцией Φ_n содержит ошибку второго порядка по отношению к отклонению $\delta\Psi$, т. е.

$$\delta E \approx \langle\delta\Psi|H|\delta\Psi\rangle = \varkappa^6 \langle\Phi'|H|\Phi'\rangle \approx \varkappa^6 \varepsilon_{el}.$$

Сравнивая это с формулой (38), получаем оценку

$$\delta E/\varepsilon_{rot} \approx \varkappa^2 \quad (\approx 10^{-2} \ll 1). \tag{54}$$

Следовательно, адиабатическое приближение при определении молекулярной волновой функции приводит к ошибке порядка $\varkappa^3$ (ур. (53)) и к ошибке при определении энергии, которая в $\varkappa^2$ раз меньше расстояния между вращательными уровнями (ур. (54)).

§ 15. Гамильтониан ядер в адиабатическим приближении

Пользуясь вариационным методом, найдем «уравнение Шредингера» для функции $\psi(X)$.

Напомним, что $\varphi_n(x, X)$ есть решение уравнения (43), норма $\varphi_n(x, X)$ при интегрировании по x равна 1

$$\varphi_n^*(x, X) = \varphi_n(x, X), \tag{55}$$

$$\int \varphi_n^2(x, X)\, dx = 1. \tag{56}$$

Функция φ_n непрерывно зависит от X и определена с точностью

до знака. В дальнейшем окажутся полезными следующие уравнения:

$$\int \varphi_n \frac{\partial \varphi_n}{\partial X_j}\, dx = 0, \tag{56'}$$

$$\int \varphi_n \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial X_j^2}\, dx = -\int \left(\frac{\partial \varphi_n}{\partial X_j}\right)^2 dx, \tag{56''}$$

которые получаются дифференцированием равенства (56). Функция $\psi(X)$ есть произвольная квадратично-интегрируемая функция переменных X.

Определив таким образом область изменения пробной функции, выразим функционал $E[\Phi_n]$ в виде функционала от $\psi(X)$. Используя свойства φ_n, легко получить

$$\langle \Phi_n \mid \Phi_n \rangle \equiv \int\int |\, \Phi_n \,|^2\, dx\, dX = \int |\, \psi \,|^2\, dX. \tag{57}$$

Можно также выписать следующее равенство:

$$\langle \Phi_n \mid H \mid \Phi_n \rangle \equiv \int\int \Phi_n^* (H\Phi_n)\, dx\, dX = \int \psi^* (H_n \psi)\, dX, \tag{58}$$

если ввести оператор

$$H_n \psi \equiv \int \varphi_n (x, X)\, [H \varphi_n (x, X)\, \psi (X)]\, dx. \tag{59}$$

Следовательно,

$$E[\Phi_n] = \frac{\int \psi^* (H_n \psi)\, dX}{\int |\, \psi \,|^2\, dX}. \tag{60}$$

Определенный тождеством (59) оператор H_n в пространстве функций $\psi(X)$ является линейным и, как будет показано ниже, эрмитовым. В адиабатическом приближении собственными функциями уравнения Шредингера для молекулы являются такие функции, на которых функционал $E[\Phi_n]$ стационарен по отношению к вариациям $\psi(X)$. В силу соотношения (60) ими будут решения уравнения на собственные значения

$$H_n \psi = E\psi. \tag{61}$$

Это и есть «уравнение Шредингера».

Уровни энергии молекулы, соответствующие электронному квантовому числу n, являются собственными значениями H_n. Соответствующие собственные функции Φ_n получаются после замены $\psi(X)$ в формуле (52) на решение (или решения) уравнения (61).

Учитывая свойства функции φ_n, можно выполнить ряд интегрирований в формуле (59) и получить более удобное для вычислений выражение H_n.

В силу уравнения (43)

$$H^{(0)}\varphi_n(x, X)\,\psi(X) = W_n(X)\,\varphi_n(x, X)\,\psi(X),$$

откуда, используя нормировку (56), получаем

$$\int \varphi_n [H^{(0)}\varphi_n\psi]\,dx = W_n(X)\,\psi(X). \tag{62}$$

Согласно формуле (39′) для кинетической энергии ядер имеем

$$T_N\varphi_n\psi = \sum_j \left(\frac{-\hbar^2}{2M_j}\right)\left[\varphi_n \frac{\partial^2\psi}{\partial X_j^2} + 2\,\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_j}\,\frac{\partial\psi}{\partial X_j} + \frac{\partial^2\varphi_n}{\partial X_j^2}\,\psi\right],$$

откуда можно вычислить

$$\int \varphi_n\,(T_N\varphi_n\psi)\,dx,$$

умножая обе части равенства на $\varphi_n(x, X)$ и интегрируя по x. Рассмотрим отдельно вклады каждого из трех слагаемых в квадратных скобках правой части равенства. В силу нормировки (56) вклад первого слагаемого равен

$$T_N\psi \equiv \sum_j \left(\frac{-\hbar^2}{2M_j}\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial X_j^2}. \tag{63}$$

Вклад второго члена равен нулю в силу соотношения (56′). Вклад третьего члена равен произведению некоторой функции $W_n'(X)$ на ψ и, используя (56″), его можно записать в виде

$$W_n'(X) = \sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j}\int \left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_j}\right)^2 dx. \tag{64}$$

Окончательно имеем

$$\int \varphi_n\,(T_N\varphi_n\psi)\,dx = (T_N + W_n')\,\psi. \tag{65}$$

Из определения (59) и уравнений (49), (62) и (65) получаем

$$H_n = T_N + W_n' + W_n. \tag{66}$$

Трем слагаемым в формуле (66) легко дать физическую интерпретацию.

Потенциальная энергия $W_n(X)$ есть среднее от оператора $H^{(0)}$, т. е. сумма энергии взаимодействия ядер и среднего значения энергии электронов в квантовом состоянии n, отвечаю-

щем определенной конфигурации ядер X. Согласно обсуждениям § 12 величина $W_n(X)$ имеет абсолютный минимум при некотором значении X_0, которое представляет собой устойчивую равновесную конфигурацию ядер.

Остальные два члена связаны с кинетической энергией ядер, усредненной по динамическому состоянию электронов. Это дает, в дополнение к собственно кинетической энергии ядер T_N, потенциальную энергию $W'_n(X)$ [1]), которая представляет собой малую поправку к потенциалу W_n. Подставляя оценку (46) в выражение (64), находим

$$W'_n(X_0) \approx \frac{\hbar^2}{Ma^2}.$$

Следовательно, потенциальная энергия W'_n положительна и равна по порядку величины вращательному кванту.

§ 16. Метод Борна — Оппенгеймера

При первоначальном рассмотрении молекул Борн и Оппенгеймер [2]) использовали метод, отличный от описанного выше вариационного метода. Их рассмотрение основывалось на разложении гамильтониана H в ряд по степеням $\varkappa$ и последующем решении задачи на собственные значения методами обычной теории возмущений.

В предыдущем параграфе мы обозначили положение минимума $W_n(X)$ через X_0. В действительности это положение равновесия определено с точностью до вращений, поскольку величина W_n инвариантна по отношению к вращению системы ядер как целого (отметим, что W'_n таким свойством, вообще говоря, не обладает). Пусть $X = (\omega, \xi)$, где ω — три угловые переменные (две — для двухатомной молекулы), которые фиксируют ориентацию системы ядер, а ξ — радиальные переменные, определяющие относительное расположение ядер. Тогда W_n зависит только от переменных ξ, и положению равновесия соответствует некоторый набор значений радиальных переменных.

Следуя Борну и Оппенгеймеру, введем новые радиальные переменные u по формуле

$$\xi = \xi_0 + \varkappa u.$$

Переменные u в соответствующих единицах задают отклонение ядер от их положений равновесия. Поскольку $\varkappa$ приблизительно равно отношению амплитуды колебания ядер к амплитуде дви-

[1]) Появление этого члена аналогично появлению члена центробежной энергии в уравнениях движения классической системы во вращающейся системе отсчета.

[2]) См. сноску к формуле (37).

жения электронов, то область изменения переменных u имеет тот же порядок величины, что и область изменения x, т. е. a.

Сделав эту замену переменных и разложив потенциал в H по степеням u, получаем разложение оператора H по степеням $\varkappa$. Член T_N имеет порядок $\varkappa^2$. Чтобы получить вращательные уровни, в разложении необходимо учесть члены порядка $\varkappa^4$. Если учесть члены порядка $\varkappa^5$, то придем с точностью до поправок высшего порядка к результату, который получается при адиабатическом приближении. Отличия возникают только в членах порядка $\varkappa^6$ и выше, что согласуется с обсуждениями, приведенными в § 12.

§ 17. Основные представления о двухатомных молекулах

Мы не будем продолжать далее общее исследование молекул в адиабатическом приближении. В частности, мы не будем обсуждать проблемы разделения колебательного и вращательного движений. Чтобы осуществить такое разделение, удобно несколько модифицировать вариационный метод, введя три набора переменных вместо двух, а именно — угловые переменные, определяющие ориентацию молекулы, переменные относительного расположения ядер и переменные, определяющие положение электронов относительно ядер. Однако мы ограничимся тем, что в заключение этого раздела приведем ряд результатов, относящихся к двухатомным молекулам.

После отделения движения центра масс динамические переменные двух ядер описывают их относительное движение. В этом случае набор координат X сводится к компонентам вектора $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2$, определяющего положение одного ядра относительного второго. Для координат электронов в системе центра масс ядер мы сохраним обозначение x. Пренебрегая для простоты изложения спином частиц [1]), обозначим (орбитальный) момент импульса электронов $\boldsymbol{L}$, а момент импульса ядер $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{G} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P})$. Тогда полный момент системы $\boldsymbol{K}$ равен

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{G} + \boldsymbol{L}. \tag{67}$$

Введем единичный вектор вдоль оси молекулы $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u} = \boldsymbol{R}/R)$ и будем обозначать индексом u компоненты векторов по этой оси. Отметим справедливость операторного тождества

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{R} = 0, \tag{68}$$

[1]) Если спин-орбитальное взаимодействие мало по сравнению с расстоянием между вращательными уровнями, то присутствие спинов несущественно меняет результаты и приводит только к появлению тонкой структуры, так же как в случае LS-связи в атомах. В противном случае общая форма спектра довольно существенно меняется. См. *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*, loc. cit. (см. сноску к § 13).

откуда следует, что $G_u (\equiv \boldsymbol{Gu})$ тождественно равно нулю и

$$K_u = L_u.$$

В остальном мы будем придерживаться обозначений предыдущего параграфа.

Рассмотрим вначале движение электронов. Свойства симметрии $H^{(0)}$ как оператора, действующего только на динамические переменные электронов, те же, что и в эффекте Штарка: $H^{(0)}$ инвариантен относительно вращений вокруг оси $\boldsymbol{u}$ и относительно отражений в плоскостях, проходящих через $\boldsymbol{u}$. Если молекула состоит из одинаковых ядер, то $H^{(0)}$ инвариантен также относительно обычного отражения $(x \to -x)$; этот случай мы пока рассматривать не будем.

Чтобы классифицировать состояния, нам достаточно вспомнить обсуждение эффекта Штарка из § XV.14. Каждый уровень $H^{(0)}$ соответствует определенному собственному значению оператора L_u^2, которое можно записать в виде $\hbar^2\Lambda^2$, где квантовое число Λ принимает все неотрицательные целые значения. Следуя спектроскопическим обозначениям, термы, которые соответствуют первым трем значениям $\Lambda = 0, 1, 2$, обозначим греческими буквами Σ, Π, Δ. Если $\Lambda \neq 0$, то уровень двукратно вырожден и имеется два собственных вектора, отвечающих собственным значениям $\hbar\Lambda$ и $-\hbar\Lambda$ компоненты момента импульса по оси молекулы. Уровни Σ $(\Lambda = 0)$ невырождены, их можно разделить на две категории Σ^+ и Σ^-, в зависимости от того инвариантен или меняет знак соответствующий им собственный вектор при отражениях в плоскости, проходящей через ось молекулы. Для большинства двухатомных молекул основное состояние есть Σ^+ состояние.

Рассмотрим теперь полный гамильтониан. Появление вырождения электронных уровней только на первый взгляд усложняет ситуацию. В действительности можно показать, что вызванное T_N взаимодействие между состояниями с $\hbar\Lambda$ и $-\hbar\Lambda$ меньше расстояния между вращательными уровнями, и, следовательно, им можно пренебречь. Другими словами, в дополнение к приближению (50) мы будем считать, что и $L_u = \text{const}$.

С другой стороны, хотя использованный в §§ 14 и 15 вариационный метод был удобен для обсуждения общей ситуации, он не позволяет легко продемонстрировать разделение вращательных и колебательных возбуждений. Трудности связаны с поправкой $W_n'(\boldsymbol{R})$, которая, вообще говоря, не инвариантна относительно вращений. Предпочтительнее учесть инвариантность H и $H^{(0)}$ относительно вращений с самого начала, и искать собственные векторы H с заданным полным моментом. Собственные векторы $H^{(0)}$ можно параметризовать:

(i) квантовыми числами полного момента K и m_K — компонентой $\boldsymbol{K}$ вдоль некоторой *фиксированной* оси (не смешивать с K_u);

(ii) квантовыми числами, определяющими состояние электронов, n и, если $\Lambda \neq 0$, s ($s \equiv \operatorname{sign} L_u$);

(iii) расстоянием между ядрами R.

Уравнение Шредингера (41) тогда примет вид

$$H^{(0)} \,|Km_K nsR\rangle = W_n(R)\,|Km_K nsR\rangle. \tag{69}$$

Адиабатическое приближение состоит в том, что собственные векторы оператора H ищутся в подпространстве с вполне определенными значениями K, m_K, n и s, т. е. среди векторов вида

$$\int_0^\infty |Km_K nsR\rangle\, y(R)\, dR \tag{70}$$

(см. формулу (51)). Так же как в §§ 14 и 15, вариационный метод приводит к уравнению Шредингера для радиальной волновой функции $y(R)$, и собственные значения определяют уровни энергии молекулы, соответствующие квантовым числам K и n (от m_K и s эти уровни не зависят).

Гамильтониан этого радиального уравнения h получается таким же способом, как и в § 15. Вклад в него от $H^{(0)}$ равен $W_n(R)$. Для вычисления вклада от кинетической энергии ядер T_N удобно записать этот оператор в виде

$$T_N = \frac{P_R^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{G}^2}{2MR^2} \tag{71}$$

(где M — приведенная масса ядер, P_R — радиальный импульс), и каждое слагаемое рассматривать отдельно. Легко показать, что первое слагаемое дает

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dR^2} + w_n'(R), \tag{72}$$

где $w_n'(R)$ — малая поправка, не зависящая от K, m_K и s. Вклад второго слагаемого, которое представляет кинетическую энергию вращения, требует более подробного анализа. Этот вклад равен произведению $\hbar^2/2MR^2$ на среднее значение оператора $\boldsymbol{G}^2$ в подпространстве векторов вида (70). Используя равенство (67), находим

$$\langle \boldsymbol{G}^2\rangle = \langle(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{L})^2\rangle = \hbar^2 K(K+1) - 2\langle \boldsymbol{K}\boldsymbol{L}\rangle + \langle \boldsymbol{L}^2\rangle.$$

Поскольку $|Km_K nsR\rangle$ — собственный вектор оператора L_u, то среднее значение компоненты $\boldsymbol{L}$ по оси, перпендикулярной $\boldsymbol{u}$, равно нулю. Отсюда, принимая во внимание соотношение (68),

получаем

$$\langle \boldsymbol{KL} \rangle = \langle K_u L_u \rangle = \langle L_u^2 \rangle = \hbar^2 \Lambda^2.$$

Среднее $\langle \boldsymbol{L}^2 \rangle$ представляет собой некоторую положительную величину, зависящую только от n. Если ввести функцию $w_n''(R) \equiv \equiv (\langle \boldsymbol{L} \rangle^2 - 2\hbar^2\Lambda^2)/2MR^2$, то для вклада от кинетической энергии вращения получим выражение

$$\frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2} + w_n''(R). \tag{73}$$

Малые поправки $w_n'(R)$ и $w_n''(R)$ можно включить в потенциал $W_n(R)$. Тогда радиальный гамильтониан примет вид

$$h \equiv -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dR^2} + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2} + W_n(R), \tag{74}$$

т. е. это гамильтониан частицы массы M с моментом импульса K в потенциале $W_n(R)$.

Отметим, что возможные значения целого числа K зависят от n. На самом деле, $K \geqslant |K_u|$. Фиксируя n, мы фиксируем Λ, и, поскольку $|K_u| = |L_u| = \Lambda$, то

$$K \geqslant \Lambda. \tag{75}$$

Собственные значения h есть уровни энергии E, и они находятся из решений радиального уравнения

$$hy(R) = Ey(R).$$

При заданных K и n это уровни энергии частицы массы M с моментом импульса K в потенциале $W_n(R)$. Для их параметризации мы будем использовать дополнительное квантовое число v. Таким образом, n — электронное квантовое число, v — колебательное квантовое число, K — вращательное квантовое число.

Основные характеристики получающегося спектра зависят от поведения функции $W_n(R)$, которая имеет четко выраженный минимум при некотором значении расстояния между ядрами R_0, отвечающем положению устойчивого равновесия ядер молекулы. Эксперимент показывает, что $W_n(R)$ можно чаще всего с хорошей степенью точности представлять как потенциал Морса (см. рис. 15 и задачу 5). Для низших уровней волновая функция $y(R)$ сосредоточена в основном в малой области вокруг R_0 (с размером порядка $\varkappa R_0$) и описывает колебания ядер около положения равновесия.

В первом (гармоническом) приближении можно заменить R в члене вращательной энергии на R_0, а вместо $W_n(R)$ подставить два первых неисчезающих члена разложения этой функции по степеням $q \equiv R - R_0$. Вводя обозначения

$$B_n = \hbar^2/2MR_0^2, \qquad W_n(R_0) = E_n, \qquad W_n''(R_0) = M\omega_n^2,$$

приходим к радиальному уравнению

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dq^2}+E_n+\frac{1}{2}M\omega_n^2q^2+B_nK(K+1)\right]y=E_{nvK}y.$$

Это уравнения Шредингера для гармонического осциллятора, следовательно,

$$E_{nvK}=E_n+\left(v+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_n+K(K+1)B_n \qquad (76)$$

$$(v=0,\ 1,\ 2,\ \ldots;\ K=\Lambda,\ \Lambda+1,\ \Lambda+2,\ \ldots).$$

Мы видим, что энергия имеет вид суммы трех слагаемых: электронной энергии E_n, энергии колебания ядер внутри молекулы $\left(v+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_n$ и вращательной энергии $K(K+1)B_n$. Наблюдаемый порядок величин квантов $\hbar\omega_n$ и B_n подтверждает анализ § 12 и последующие заключения о структуре молекулярных спектров [1]).

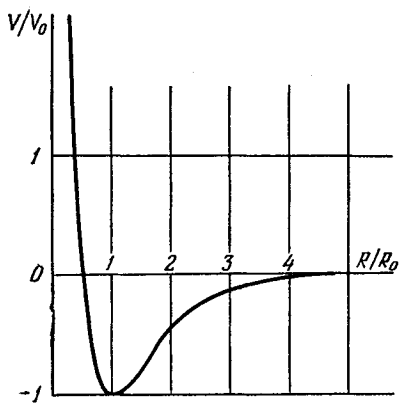


Рис. 15. Потенциал Морса $V=V_0\left(e^{-2(R-R_0)/b}-2e^{-(R-R_0)/b}\right)$. R_0 — расстояние между ядрами в положении равновесия, V_0 — значение потенциала в этой точке. Ширина минимума тем меньше, чем меньше отношение b/R_0. На рисунке $b/R_0=0{,}68$, что соответствует молекуле водорода.

Мы не будем здесь останавливаться на тех изменениях, которые необходимо сделать в теории, чтобы учесть существование спина.

Упомянем только об одном замечательном эффекте, который связан со спином и статистикой ядер. Поскольку взаимодействие спинов ядер с остальной частью молекулы пренебрежимо мало, основной эффект состоит в спиновом вырождении или кратности каждого из уровней. Собственная функция молекулы имеет вид

$$\Psi=\Phi(\boldsymbol{R},\ x)\,\chi(\mu_1,\ \mu_2)$$

---

[1]) Для электронного основного состояния молекулы водорода (состояние Σ^+) первые уровни хорошо описываются этой формулой с $E_0=-4{,}72$ *эв*, $\hbar\omega_0=0{,}54$ *эв* и $B_0=0{,}0074$ *эв*. Эти числа соответствуют расстоянию между ядрами $R_0=0{,}74\cdot10^{-8}$ *см*. Для колебательных и вращательных спектров получается более хорошее согласие, если использовать для их вычисления в качестве $W_0(R)$ потенциал Морса с $V_0=4{,}72$ *эв*, $R_0=0{,}74\cdot10^{-8}$ *см* и $b=0{,}68\,R_0$ (см. рис. 15 и задачу 5); энергия диссоциации молекулы равна $V_0-\frac{1}{2}\hbar\omega_0$.

и кратность вырождения равна числу линейно независимых функций $\chi(\mu_1, \mu_2)$, которые могут быть построены. Если спины двух ядер равны j_1 и j_2, то существует $(2j_1+1)\ (2j_2+1)$ таких функций. Если ядра различны, то дополнительных ограничений на функцию Ψ нет и кратность каждого уровня равна $(2j_1+1)\ (2j_2+1)$. Если же мы имеем два тождественных ядра со спином j ($j_1 = j_2 = j$), то волновая функция Ψ должна быть симметричной или антисимметричной относительно замены

$$\boldsymbol{R} \leftrightarrow -\boldsymbol{R}, \qquad \mu_1 \leftrightarrow \mu_2$$

в зависимости от того, являются ли ядра бозонами или фермионами, т. е. целое или полуцелое число j. В $(2j+1)^2$-мерном пространстве функций χ можно построить $(j+1)(2j+1)$ симметричных функций и $j(2j+1)$ антисимметричных функций (задача XIII. 13). Следовательно, кратность g зависит от того, симметрична или антисимметрична функция $\Psi(\boldsymbol{R}, x)$, другими словами, она зависит от четности функции Φ при отражении только координат ядер. Вводя для этой четности обозначение $\tilde{\omega}$ ($\tilde{\omega} = \pm 1$), мы имеем

$$g = \begin{cases} \text{(j целое)} & \text{(j полуцелое)} & \\ (j+1)(2j+1) & j(2j+1), & \text{если } \tilde{\omega} = +1, \\ j(2j+1) & (j+1)(2j+1), & \text{если } \tilde{\omega} = -1. \end{cases}$$

Интересное следствие вытекает из того факта, что $\tilde{\omega}$ зависит от четности полного орбитального момента. Можно показать, что $\tilde{\omega} = (-1)^K \tilde{\omega}_e$, где $\tilde{\omega}_e (= \pm 1)$, зависит от поведения электронной волновой функции, соответствующей Φ, относительно отражения. Если $\Lambda \neq 0$, то каждому уровню отвечают две электронные волновые функции противоположной четности $\tilde{\omega}_e$. Для уровней Σ ($\Lambda = 0$) существует только одна волновая функция с вполне определенным значением четности $\tilde{\omega}_e$ ($+1$ или -1), и кратность g меняется характерным образом при переходе от одного вращательного уровня к другому [1]).

Эти характерные черты энергетического спектра Σ уровней двухатомных молекул, состоящих из одинаковых ядер, легко можно наблюдать при экспериментальном исследовании полосатых спектров таких молекул. Поскольку вероятности оптических переходов между состояниями с различными спиновыми функциями очень малы, практически наблюдаются только переходы, сохраняющие четность K. Кроме того, при обычных условиях наблюдения относительная интенсивность линий, соответствующих четным значениям K, и линий, соответствующих нечетным значениям K, непосредственно связана с отношением

[1]) В частности, если $j = 0$, то отсутствуют уровни с $\tilde{\omega} = -1$ и K может принимать только значения вполне определенной четности.

вычисленных выше кратностей, т. е. равна либо $(j+1)/j$, либо $j/(j+1)$ в зависимости от знака $\tilde{\omega}_e$ и того, являются ли ядра бозонами или фермионами. Это позволяет непосредственно измерять спины ядер.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пусть E_0 и Ψ_0 — энергия и волновая функция основного состояния данной квантовой системы. Вычисление вариационным методом дает энергию E_{var} и волновую функцию Ψ_{var}. Будем считать Ψ_0 и Ψ_{var} нормированными на единицу и введем обозначение $\varepsilon = 1 - |\langle\Psi_0|\Psi_{\text{var}}\rangle|^2$. Величина ε равна норме проекции функции Ψ_{var} на подпространство, ортогональное Ψ_0, и характеризует отличие состояния Ψ_{var} от Ψ_0. Доказать, что

$$E_{\text{var}} - E_0 \geqslant \varepsilon\,(E_1 - E_0)$$

(E_1 — энергия первого возбужденного уровня). Показать, что результаты § 4 удовлетворяют этому неравенству, и провести обсуждение.

2. Предполагая известной волновую функцию основного состояния атома водорода, вычислить первый возбужденный уровень, выбирая в качестве пробной функции ту часть функции $u = \rho e^{-b\rho}$, которая ортогональна волновой функции основного состояния (обозначения § 4). Сравнить с точным собственным значением и волновой функцией.

3. Доказать неравенства (11) и (12).

4. Выбирая в качестве пробной функции $u = \rho^{l+1}e^{-b\rho}$ (обозначения § 4), вычислить низший уровень атома водорода, соответствующий моменту импульса l. Сравнить с точным ответом и прокомментировать.

5. Рассмотреть частицу с массой M на прямой в *потенциале Морса*

$$V(q) = V_0\left[e^{-2q/b} - 2e^{-q/b}\right].$$

Найти волновые функции и уровни энергии.

N. B. Волновое уравнение сводится к уравнению Лапласа следующей заменой функции и аргумента:

$$\xi = 2K_0 b e^{-q/b}, \qquad w(\xi) = e^{\frac{1}{2}\xi}\xi^{-\varkappa b}\psi(q),$$

где

$$K_0 = \sqrt{2MV_0}/\hbar \qquad \varkappa = \sqrt{-2ME}/\hbar.$$

Имеется конечное число дискретных собственных значений, зависимость которых от целого числа n определяется формулой

$$E_n = -V_0\left(1 - \frac{n+\frac{1}{2}}{K_0 b}\right)^2 \qquad \left(0 \leqslant n \leqslant K_0 b - \frac{1}{2}\right).$$

ГЛАВА XIX
ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

§ 1. Введение

До сих пор мы рассматривали лишь простейшие задачи теории столкновений: рассеяние элементарной частицы на центральном потенциале и столкновение двух частиц. Вторая задача сводится к первой после разделения движения центра масс и относительного движения. Решение задач такого типа было приведено в главе X, в дальнейшем оно было дополнено обсуждением кулоновского рассеяния (гл. XI, раздел II) и рассеяния двух тождественных частиц (§ XIV. 9—10). Кроме этого, в § XVII. 5 мы получили простое выражение для сечения рассеяния частицы на потенциале $V(r)$, считая потенциал $V(r)$ возмущением и ограничиваясь только эффектами первого порядка (ур. (XVII. 54)). Однако рассуждения в § XVII. 5 основывались на нестрогом определении сечения, которое необходимо обосновать.

В этой главе мы, с одной стороны, построим формализм, позволяющий рассматривать процессы столкновения сложных (составных) частиц, а с другой стороны, покажем как применять для вычисления сечений рассеяния теорию возмущений и вариационные методы, которые были развиты в предыдущих главах.

Существуют два различных способа изложения этих вопросов. Первый — состоит в строгом обосновании определения сечения из § XVII. 5 с использованием таких понятий как вероятность в единицу времени и единичный падающий поток и связи этих величин с матричными элементами оператора эволюции $U(t, t')$ в пределе, когда $t \to +\infty$, $t' \to -\infty$. Второй способ представляет собой простое обобщение рассуждений из раздела I главы X, согласно которым сечения рассеяния непосредственно связаны с асимптотическим поведением стационарных решений уравнения Шредингера. В данной главе мы будем следовать второму из этих эквивалентных подходов [1]).

[1]) Изложение первого способа см. в работах: *B. Lippmann, J. Schwinger.* Phys. Rev. **79**, 469 (1969); *M. Gell-Mann, M. L. Goldberger.* Phys. Rev. **91**, 398 (1953). Определение сечения, имеющееся в этих работах, в некоторых аспектах дискуссионно. Обсуждение этих вопросов и возможные их решения приведены в статье *S. Sunakawa.* Prog. Theor. Phys. **14**, 175 (1955).

Глава состоит из пяти разделов. В первых двух разделах развивается формализм и описывается теория возмущений на простом примере рассеяния частицы на потенциале $V(r)$. Обобщение этих методов на случай сложных столкновений проведено в разделе III. В следующем разделе рассматриваются вариационные методы. Свойства амплитуд рассеяния, которые следуют из таких общих свойств гамильтониана как эрмитовость, инвариантность относительно обращения времени, симметрия, приведены в разделе V.

Раздел I. СВОБОДНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА И ПРИБЛИЖЕНИЕ БОРНА

§ 2. Интегральные представления амплитуды рассеяния

В этом и следующем разделах мы будем обсуждать рассеяние частицы массы m на потенциале $V(r)$. Обозначим оператор кинетической энергии H_0, а полный гамильтониан H

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \tag{1}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r). \tag{2}$$

Предположим, что потенциал V асимптотически стремится к нулю быстрее, чем $1/r$. Потенциалы типа $1/r$ будут кратко исследованы в § 15.

В дальнейшем у нас появятся различные типы волн, которые мы будем обозначать соответствующими буквами. Так, букву φ зарезервируем за плоскими волнами, ψ — за стационарными решениями гамильтониана H. Для заданного волнового вектора $\boldsymbol{k}$ определим:

(i) плоскую волну $\varphi_{\boldsymbol{k}} \equiv e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$;

(ii) стационарные волны $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$, которые характеризуются соответственно асимптотическим поведением: $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ + расходящаяся волна и $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ + сходящаяся волна.

В частности, если $\boldsymbol{k}_a$ — волновой вектор падающих на потенциал частиц, а E — их энергия ($k_a = k = (2mE)^{1/2}$), то стационарная волна рассеяния (определение § X.3) есть $\psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}$. Это решение и амплитуда рассеяния $f_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}$ определяются условиями

$$H\psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)} = E\psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}, \quad \psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}} + f_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{3}$$

Сечение рассеяния в направлении Ω_b обозначим $d\sigma_{a\to b}/d\Omega$. В главе X было показано, что

$$d\sigma_{a\to b}/d\Omega = \left|f_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}(\Omega_b)\right|^2.$$

Пусть $\boldsymbol{k}_a$ — вектор длины k в направлении Ω_b. В этом разделе будут фигурировать только стационарные волны, определяемые векторами $\boldsymbol{k}_a$ и $\boldsymbol{k}_b$. Поэтому для упрощения записи мы будем систематически заменять индексы $\boldsymbol{k}_a$, $\boldsymbol{k}_b$ на a, b соответственно.

Установим прежде всего наиболее общие свойства амплитуд рассеяния. Рассмотрим два потенциала $U(\boldsymbol{r})$ и $\hat{U}(\boldsymbol{r})$ и обозначим стационарные решения для соответствующих гамильтонианов соответственно ξ и $\hat{\xi}$. Наибольший интерес для нас будут представлять решения $\hat{\xi}_b^{(-)}$ и $\xi_a^{(+)}$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\hat{U}\right)\hat{\xi}_b^{(-)}=E\hat{\xi}_b^{(-)}, \tag{5}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U\right)\xi_a^{(+)}=E\xi_a^{(+)}, \tag{6}$$

$$\hat{\xi}_b^{(-)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\boldsymbol{k}_b\boldsymbol{r}}+\hat{f}_b^{(-)}(\Omega)\frac{e^{-ikr}}{r}, \tag{7}$$

$$\xi_a^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}}+f_a^{(+)}(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{8}$$

Покажем, что

$$\langle\hat{\xi}_b^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi_a^{(+)}\rangle\equiv\int\hat{\xi}_b^{(-)*}(\boldsymbol{r})\,(U(\boldsymbol{r})-\hat{U}(\boldsymbol{r}))\,\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}=$$

$$=-\frac{2\pi\hbar^2}{m}\left(f_a^{(+)}(\Omega_b)-\hat{f}_b^{(-)*}(-\Omega_a)\right) \tag{9}$$

(посредством $-\Omega_a$ обозначаем направление, противоположное Ω_a).

Доказательство проведем аналогично тому, которое использовалось в § X. 17 при получении интегральных представлений для фазовых сдвигов. В случае, когда это не будет приводить к недоразумениям, мы будем опускать индексы b, a и символ $\hat{}$. Умножим уравнение (6) на $\xi^{(-)*}$ и вычтем из него равенство, полученное умножением выражения комплексно-сопряженного к уравнению (5) на $\xi^{(+)}$. Так как $\hat{U}$ вещественно, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\xi^{(-)*}(\Delta\xi^{(+)})-(\Delta\xi^{(-)*})\xi^{(+)}\right)+\xi^{(-)*}(U-\hat{U})\xi^{(+)}=0.$$

Интегрируя по объему сферы радиуса R с центром в начале координат, имеем

$$\langle\xi^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi^{(+)}\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{R\to\infty}\int\limits_{r<R}\left(\xi^{(-)*}(\Delta\xi^{(+)})-(\Delta\xi^{(-)*})\xi^{(+)}\right)d\boldsymbol{r}. \tag{10}$$

Несмотря на эрмитовость оператора Δ, интеграл в правой части не обязан исчезать в пределе, так как функции ξ не яв-

ляются квадратично интегрируемыми. Используя теорему Грина, преобразуем этот интеграл в поверхностный интеграл по сфере радиуса R.

Пусть ξ_1 и ξ_2 — функции от r, будем обозначать интеграл по такой сфере от «радиального вронскиана»

$$W[\xi_1, \xi_2] \equiv \xi_1 \frac{\partial \xi_2}{\partial r} - \xi_2 \frac{\partial \xi_1}{\partial r}$$

следующим образом:

$$\{\xi_1, \xi_2\} \equiv \int W[\xi_1, \xi_2]\,|_{r=R}\, R^2\, d\Omega = \int W[r\xi_1, r\xi_2]\,|_{r=R}\, d\Omega. \qquad (11)$$

В силу теоремы Грина имеем

$$\{\xi_1, \xi_2\} = \int\limits_{r<R} (\xi_1 (\Delta\xi_2) - (\Delta\xi_1)\,\xi_2)\, d\boldsymbol{r}.$$

Уравнение (10) можно теперь переписать так:

$$\langle \xi^{(-)} |\, (U - \hat{U})\, | \xi^{(+)} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \lim_{R\to\infty} \{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\}. \qquad (12)$$

Поверхностный интеграл $\{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\}$ стремится асимптотически к константе, которую можно легко вычислить, подставляя вместо функций ξ и их производных первый член их асимптотического разложения по степеням $1/r$. Используя формулы (7) и (8), находим

$$\lim_{R\to\infty} \{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\} = \lim_{R\to\infty} \{e^{-ik_b r}, e^{ik_a r}\} + \lim_{R\to\infty} \left\{e^{-ik_b r}, f^{(+)} \frac{e^{ikr}}{r}\right\} +$$
$$+ \lim_{R\to\infty} \left\{f^{(-)*} \frac{e^{ikr}}{r}, e^{ik_a r}\right\} + \lim_{R\to\infty} \left\{f^{(-)*} \frac{e^{ikr}}{r}, f^{(+)} \frac{e^{ikr}}{r}\right\}. \qquad (13)$$

Асимптотика плоской волны имеет вид (задача 1):

$$e^{ikr} \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \frac{2\pi}{ikr} [\delta(\Omega_r - \Omega_k)\, e^{ikr} - \delta(\Omega_r + \Omega_k)\, e^{-ikr}] + O\left(\frac{1}{r^2}\right). \qquad (14)$$

В правой части равенства Ω_r и Ω_k обозначают направления векторов $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{k}$, δ-функции определяются их свойством

$$\int \delta(\Omega' - \Omega)\, \varphi(\Omega')\, d\Omega' = \varphi(\Omega),$$

справедливым для любой (гладкой) функции φ от угловых переменных Ω. Если мы заменим плоские волны в правой части формулы (13) их асимптотическими выражениями, то интегрирование по углам легко выполняется. Поскольку векторы $\boldsymbol{k}_b$ и $\boldsymbol{k}_a$ имеют одинаковую длину, то первый член равен нулю (в согласии с результатом задачи 2). Во втором члене только *сходящаяся* часть плоской волны дает ненулевой вклад, кото-

рый равен $-4\pi f^{(+)}(\Omega_b)$. То же верно и для третьего слагаемого, чей вклад равен $4\pi f^{(-)*}(-\Omega_a)$. Четвертое слагаемое равно нулю. Таким образом, имеем

$$\lim_{R\to\infty}\{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\} = -4\pi\left(f^{(+)}(\Omega_b) - f^{(-)*}(-\Omega_a)\right).$$

Подставляя этот результат в уравнение (12), получаем соотношение (9). ■

Наиболее интересное свойство соотношения (9) — его независимость от конкретной формы потенциалов U и $\hat{U}$. Требуется только, чтобы потенциалы были вещественными и убывали на бесконечности быстрее, чем $1/r$.

В качестве первого примера возьмем

$$U = V, \quad \hat{U} = 0.$$

Соотношение (9) тогда примет вид

$$\langle\varphi_b | V | \psi_a^{(+)}\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a^{(+)}(\Omega_b). \tag{15}$$

Это интегральное представление амплитуды рассеяния будет использовано в следующих двух параграфах в качестве исходного для борновского приближения.

Положим теперь

$$U = \hat{U} = V.$$

Левая часть соотношения (9) обращается в нуль и, следовательно, две амплитуды в правой части равны друг другу

$$f_a^{(+)}(\Omega_b) = f_b^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{16}$$

Наконец, пусть

$$U = 0, \quad \hat{U} = V.$$

Тогда

$$\langle\psi_b^{(-)} | V | \varphi_a\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_b^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{17}$$

Сравнивая соотношения (15), (16) и (17), получаем важное равенство

$$\langle\psi_b^{(-)} | V | \varphi_a\rangle = \langle\varphi_b | V | \psi_a^{(+)}\rangle. \tag{18}$$

§ 3. Сечение рассеяния и T-матрица. Микрообратимость

Если подставить интегральное представление амплитуды рассеяния (15) в формулу (4), то получим следующее выражение для сечения рассеяния:

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\langle\varphi_b | V | \psi_a^{(+)}\rangle\right|^2.$$

Для того чтобы преобразовать это выражение к виду, напоминающему формулу (XVII.54), мы введем в согласии с определением § XVII.5 (ур. (XVII.52)) плотность состояний с энергией

$$\rho(E) = (2\pi\hbar)^{-3} p^2 (dp/dE) = mk/(2\pi\hbar)^3,$$

начальную скорость обозначим $v = \hbar k/m$. Тогда формула для сечения рассеяния принимает вид [1])

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v} |\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle|^2 \rho(E). \tag{19}$$

Поскольку $|\psi_a^{(+)}\rangle$ и $|\varphi_b\rangle$ не являются базисными векторами в одном и том же представлении, то, строго говоря, $\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$ не является матричным элементом оператора V. Удобно ввести матрицу

$$T_{a\to b} \equiv \langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle. \tag{20}$$

Будем называть T *матрицей перехода*, а элемент $T_{a\to b}$ *амплитудой перехода* $a \to b$. Следует отметить, что матричные элементы берутся между плоскими волнами с одной и той же энергией. Можно, очевидно, рассматривать T как оператор в гильбертовом пространстве, удовлетворяющий условию (20). Однако это условие не определяет оператор полностью, оно фиксирует лишь некоторые матричные элементы в представлении, базисом которого являются плоские волны. Для полного определения T следует задать его матричные элементы между волнами, отвечающими различным значениям энергии. Это будет сделано позже.

Формулу (19) теперь можно записать так:

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v} |T_{a\to b}|^2 \rho(E). \tag{19'}$$

Вспомним свойство микрообратимости. Обозначим индексами Ka и Kb различные волны, отвечающие импульсам $-\boldsymbol{k}_a$ и $-\boldsymbol{k}_b$. Для плоских волн имеем очевидное равенство

$$\varphi_{-\boldsymbol{k}} = \varphi_{\boldsymbol{k}}^*.$$

Кроме этого, в силу вещественности гамильтониана

$$\psi_{-\boldsymbol{k}}^{(\mp)} = \psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)*}.$$

---

[1]) При другом изложении теории столкновений (см. предыдущую сноску) эта формула получается естественным образом непосредственно из определения сечения рассеяния.

В частности,

$$\varphi_a = \varphi^*_{Ka}, \quad \psi_b^{(-)} = \psi_{Kb}^{(+)*},$$

и поскольку V вещественно «матричные элементы» $\langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle$ и $\langle \varphi_{Ka} | V | \psi_{Kb}^{(+)} \rangle$ равны. Следовательно, соотношение (18) можно переписать так:

$$\langle \varphi_{Ka} | V | \psi_{Kb}^{(+)} \rangle = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$$

или, пользуясь определением (20),

$$T_{Kb \to Ka} = T_{a \to b}. \tag{21}$$

A fortiori эти две амплитуды имеют одинаковые модули. Возвращаясь к формуле (19′), мы получаем *свойство микрообратимости упругого рассеяния* [1])

$$d\sigma_{Kb \to Ka}/d\Omega = d\sigma_{a \to b}/d\Omega. \tag{22}$$

§ 4. Борновское приближение

Формула (19) — *точная*. Подобно формуле (X. 2), из которой она была выведена, она связывает сечение рассеяния со стационарным решением $\psi_a^{(+)}$. В данном случае решение $\psi_a^{(+)}$ фигурирует не в асимптотической форме, а полностью как множитель в интеграле. Если заменить его приближенным решением, то мы получим приближенное выражение для сечения.

В частности, для достаточно малых $V(r)$ решение $\psi_a^{(+)}$ мало отличается от падающей плоской волны φ_a и может быть заменено последней при вычислении амплитуды перехода. Это дает *борновское приближение*

$$T_{a \to b} \approx T^{(B)}_{a \to b} = \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle. \tag{23}$$

В этом приближении равенство (15) сводится к формуле (XVII. 54), оправдывая наше предположение о том, что оно дает приближенное выражение для сечения в пределе, когда $V(r)$ можно рассматривать как возмущение.

Пусть

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_b - \boldsymbol{k}_a,$$

$\hbar \boldsymbol{q}$ — импульс, переданный частице в процессе столкновения (рис. 16). Длина вектора $\boldsymbol{q}$ зависит от угла рассеяния θ между векторами $\boldsymbol{k}_a$ и $\boldsymbol{k}_b$ следующим образом:

$$q = 2k \sin \tfrac{1}{2}\theta \quad (k = k_a = k_b). \tag{24}$$

[1]) Для центрального потенциала это свойство можно вывести из инвариантности относительно вращений. Здесь мы убедились, что оно выполняется и для нецентральных потенциалов.

Из формулы (23) имеем

$$T^{(B)}_{a\to b} = \int e^{-i\,qr}\, V(r)\, dr \equiv \mathcal{V}(q). \tag{25}$$

Таким образом, в борновском приближении сечение рассеяния принимает особенно простой вид

$$\frac{d\sigma^{(B)}_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |\,\mathcal{V}(q)\,|^2. \tag{26}$$

Сечение пропорционально квадрату модуля преобразования Фурье от $V(r)$, соответствующего импульсу, переданному при столкновении. Отметим, что зависимость сечения от энергии и угла входит только посредством вектора q.

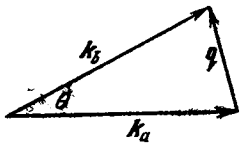


Рис. 16.

Для центрального потенциала ситуация еще проще. После интегрирования по углам правая часть (25) становится равной

$$\mathcal{V}(q) = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty \sin qr\, V(r)\, r\, dr. \tag{27}$$

Дифференциальное сечение зависит в этом случае только от величины $\hbar q$ переданного импульса. Используя в качестве переменной интегрирования q вместо θ, получим полное сечение σ_{tot}

$$\sigma^{(B)}_{\text{tot}} = \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2}\int_0^{2k} \mathcal{V}^2(q)\, q\, dq. \tag{28}$$

Из этих формул можно вывести ряд общих заключений относительно поведения сечений при высоких энергиях. Обозначим радиус действия потенциала $V(r)$ через a. Так как вещественная функция $V(r)$ существенно отлична от нуля только в области с линейными размерами порядка a, то ее преобразование Фурье сосредоточено в начале координат в области с линейными размерами порядка $1/a$ [1]).

Следовательно, сечение рассеяния отлично от нуля только в области, где $q \lesssim 1/a$. Согласно формуле (24) эта область соответствует углам рассеяния

$$\sin\frac{1}{2}\theta \lesssim \frac{1}{2ka}.$$

[1]) В данном контексте в качестве a можно брать величину порядка среднеквадратичного отклонения распределения

$$\frac{V^2(r)}{\int V^2(r')\, dr'}.$$

При высоких энергиях ($ka \gg 1$) происходит *в основном рассеяние вперед* в конусы с углом θ меньше, чем $1/ka$. Эти выводы основаны на борновском приближении, их можно сравнить с результатами о высокоэнергетическом рассеянии на твердой сфере (§ X. 13).

Полное сечение стремится к нулю как $1/E$. Результат с очевидностью следует из формулы (28), откуда получаем следующую асимптотику:

$$\sigma_{\text{tot}}^{(B)} \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2} \int_0^\infty \mathcal{V}^2(q)\, q\, dq. \tag{29}$$

Эти выводы легко обобщить и на случай нецентральных потенциалов.

§ 5. Интегральное уравнение теории рассеяния

До сих пор $\psi_a^{(+)}$ определялось как решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее определенным асимптотическим условиям. Теперь мы покажем, что $\psi_a^{(+)}$ является также решением некоторого интегрального уравнения. В результате мы сможем разложить $\psi_a^{(+)}$ в ряд по степеням потенциала V и вычислить поправки к борновскому приближению. Для этого мы воспользуемся тождеством [1])

$$(\Delta + k^2)\frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r}).$$

Из него следует, что функция

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{30}$$

удовлетворяет уравнению

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + k^2)\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \tag{31}$$

$\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ — функция Грина свободной частицы с энергией $E = \hbar^2 k^2/2m$. Комплексно-сопряженная функция обладает тем же свойством.

---

[1]) Это тождество следует понимать в смысле обобщенных функций, e^{ikr}/r — дифференцируемо произвольное число раз. При вычислении лапласиана мы используем тождество

$$\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

и свойство

$$\Delta(fg) = (\Delta f)\, g + 2(\nabla f)(\nabla g) + f\,\Delta g.$$

Запишем уравнение Шредингера для $\psi_a^{(+)}$

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + k^2)\psi = V\psi. \tag{32}$$

Предположим, что нам известна функция $F(r) \equiv V(r)\psi(r)$. Тогда для $\psi(r)$ получим неоднородное дифференциальное уравнение в частных производных. Из (31) следует, что функция

$$\hat{\psi}(r) \equiv \int \mathcal{G}(r, r') F(r')\, dr'$$

является решением этого уравнения. Общее решение получится добавлением к $\hat{\psi}(r)$ общего решения однородного уравнения. Другими словами, если ψ удовлетворяет уравнению (32), то $\psi - \hat{\psi}$ — плоская волна с той же энергией

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + k^2)(\psi - \hat{\psi}) = 0 \tag{33}$$

и наоборот.

Для полного определения этой плоской волны необходимо найти ее асимптотическое поведение. Покажем вначале, что $\hat{\psi}$ стремится асимптотически к расходящейся волне. Подставляя в (30) асимптотическое разложение

$$|r - r'| \equiv r\left[1 - 2\frac{rr'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}\right]^{\frac{1}{2}} \underset{r\to\infty}{\sim} r - \frac{r}{r}r' + O\left(\frac{r'}{r}\right),$$

для $r \gg r'$ имеем

$$\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ikr'} + O\left(\frac{r'}{r}\right) \quad (k = kr/r) \tag{34}$$

отсюда

$$\hat{\psi}(r) \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-ikr'} V(r')\psi(r')\, dr'. \tag{35}$$

Это выражение справедливо, когда r много больше радиуса действия потенциала ($r \gg a$). Следовательно, если асимптотика ψ определена формулой (3), то $\psi - \hat{\psi}$ будет также иметь асимптотику (e^{ikz} + расходящаяся волна). Поскольку она также удовлетворяет уравнению (33), то она должна быть плоской волной. Поэтому

$$\psi_a^{(+)} = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r')\psi_a^{(+)}(r')\, dr'. \tag{36}$$

Уравнение (36) эквивалентно уравнению (3). Оно называется *интегральным уравнением теории рассеяния.*

Используя (34), асимптотическое поведение $\psi_a^{(+)}$ можно вывести непосредственно из правой части уравнения (36); свойство (15) можно доказать тем же способом.

Приведенные рассуждения можно повторить, заменив функцию $\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ на комплексно сопряженную $\mathcal{G}^*(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, которая также является функцией Грина свободной частицы, но соответствует асимптотическому условию со сходящейся (сферической) волной. В результате получим интегральное уравнение

$$\psi_a^{(-)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{-ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} V(\boldsymbol{r}')\,\psi_a^{(-)}(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}'. \qquad (37)$$

§ 6. Борновское разложение

Уравнения (36) и (37) можно решать итерациями. Метод аналогичен тому, который использовался при решении уравнения (XVII. 13) нестационарной теории возмущений.

Рассмотрим уравнение (36). Подставляя вместо $\psi_a^{(+)}$ в интеграл в правой части равенства плоскую волну $e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}}$, получаем

$$\psi_1^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}} + \int \mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\,V(\boldsymbol{r}')\,e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}'}\,d\boldsymbol{r}'.$$

Подставляя $\psi_1^{(+)}$ вместо $\psi_a^{(+)}$, получим

$$\psi_2^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}} + \int \mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\,V(\boldsymbol{r}')\,\psi_1^{(+)}(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}'.$$

Аналогично получаем $\psi_3^{(+)}$ и так далее. При подходящих условиях возникающая в результате этой процедуры последовательность сходится к точному решению $\psi_a^{(+)}$. Тем самым оно представимо в виде разложения по степеням V

$$\psi_a^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}} + \sum_{n=1}^{\infty}\int K_n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\,e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}'}\,d\boldsymbol{r}', \qquad (38)$$

где

$$K_n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \int K_1(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'')\,K_{n-1}(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}'', \qquad (n > 1),$$
$$K_1(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\,V(\boldsymbol{r}').$$

Это *борновское разложение* стационарной рассеянной волны.

Аналогичное разложение для $T_{a\to b}$ можно получить, подставляя разложение $\psi_a^{(+)}$ в интеграл $\langle \Phi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$. Это разложение

по степеням V сходится для достаточно малых V [1]). Оставляя в разложении только первый член, получаем борновское приближение.

§ 7. Критерий применимости борновского приближения

Для того чтобы борновское приближение имело смысл, необходимо, чтобы ошибка, сделанная при вычислении $T_{a\to b}$, когда $\psi_a^{(+)}$ заменяем на плоскую волну φ_a, была пренебрежимо малой. Следовательно, в области, где потенциал V отличен от нуля, точная стационарная волна должна мало отличаться от плоской. Полагая

$$\psi'(\boldsymbol{r}) \equiv \psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) - e^{i\boldsymbol{k}_a\boldsymbol{r}},$$

получим условие

$$|\psi'(\boldsymbol{r})| \ll 1 \tag{39}$$

(во всех точках, где $V(\boldsymbol{r})$ относительно велико).

Можно оценить ψ', оставляя первый член ее борновского разложения. Выбирая ось z вдоль $\hat{\boldsymbol{k}}_a$, после очевидной замены переменных получим

$$\psi'(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} e^{ikz} I(\boldsymbol{r}),$$

$$I(\boldsymbol{r}) \equiv \int e^{ik(R+z)} V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{R}/R.$$

Так как в экспоненте присутствует k, $|I|$ зависит от энергии. Однако можно получить независимую от энергии оценку сверху для $I(\boldsymbol{r})$, заменяя выражение под знаком интеграла на его модуль:

$$|I| < \int |V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})|\, d\boldsymbol{R}/R. \tag{40}$$

Обозначим через a радиус действия потенциала [2]), а V_0 — его среднее значение. В соответствующей области изменения переменной $\boldsymbol{r}$ верхняя оценка равна приблизительно $2\pi V_0 a^2$, и бор-

---

[1]) Сходимость борновского приближения исследована в работах: *R. Jost, A. Pais.* Phys. Rev. 82, 840 (1951); *W. Kohn.* Rev. Mod. Phys. 26, 292 (1954). Интегральное уравнение, полученное в нестационарной теории возмущений (гл. XVII), является уравнением вольтерровского типа. Если бы $U^{(0)}$ и V были функциями, а не операторами, то разложение для U, полученное итерационной процедурой, всегда бы сходилось. Возможное отсутствие сходимости целиком обусловленно операторной природой $U^{(0)}$ и V. ($U^{(0)}$ и V — операторы в гильбертовом пространстве.) С другой стороны, интегральное уравнение, рассматриваемое нами здесь, имеет фредгольмов тип, и борновское разложение не всегда сходится.

[2]) См. сноску к § 4.

новское приближение справедливо при всех энергиях, если

$$V_0 \ll \hbar^2/ma^2. \tag{41}$$

Это условие, очевидно, слишком ограничительное. Интеграл $|I|$ достигает предела, определяемого (40), только при достаточно малых энергиях, когда множитель $e^{ik(R+Z)}$ практически постоянен в области изменения потенциала [1]), т. е. когда $ka \ll 1$. Если же $ka \gg 1$, то этот множитель быстро осциллирует в рассматриваемой области, и приведенная оценка излишне груба. При $k \to \infty$ осцилляции становятся все быстрее, и интеграл I стремится к нулю. Мы можем, следовательно, ожидать, что борновское приближение будет справедливым при достаточно больших энергиях.

Асимптотическое поведение I при больших энергиях можно получить методом стационарной фазы. Основной вклад дает область, окружающая точки, где осциллирующий фазовый множитель стационарен, эта область окружает полуось $X = Y = 0$, $Z < 0$. Опуская детали вычислений [2]), получаем

$$I \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{2\pi i}{k} \int\limits_{-\infty}^{z} V(x, y, z')\, dz' + O(k^{-2}). \tag{42}$$

Поэтому в таком пределе $|I|$ имеет порядок $2\pi V_0 a/k$ в рассматриваемой области изменения r. Критерий (39) будет выполнен, если

$$ka \gg 1, \quad V_0 \ll \hbar^2 k/ma. \tag{43}$$

Для того чтобы получить критерий применимости борновского приближения для промежуточных энергий, когда неравенство (41) не выполнено, необходимо оценивать интеграл I в каждом конкретном случае. На практике его обычно оценивают для одной специально выбранной точки в области изменения потенциала, например, $r = 0$. Для центрального потенциала после интегрирования по углам получим

$$I(0) = \frac{2\pi i}{k} \int\limits_{0}^{\infty} (1 - e^{2ikr})\, V(r)\, dr.$$

---

[1]) Если знак V постоянен. Более того, мы имеем

$$I(\boldsymbol{r}) \underset{k\to 0}{\sim} \int V(\boldsymbol{R} + \boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{R}/R.$$

[2]) См., например, *L. I. Schiff.* Phys. Rev. **103**, 443 (1956).

Это выражение хорошо согласуется с формулами (40) и (42). Отсюда получаем критерий

$$\left|\int_0^\infty (1 - e^{2ikr})\, V(r)\, dr\right| \ll \hbar^2 k/m. \tag{44}$$

В теории столкновений величиной, характеризующей сечение, служит *геометрическое сечение рассеяния* $4\pi a^2$, соответствующее области взаимодействия частиц, размеры которой порядка a. Когда применимо борновское приближение, полное сечение мало по сравнению с этой величиной:

$$\sigma_{\text{tot}} \ll \text{геометрическое сечение}. \tag{45}$$

Докажем это неравенство в двух предельных случаях: $ka \ll 1$ и $ka \gg 1$. Воспользуемся выражением (28) для полного сечения. В соответствии с определением (ур. (25)), функция $\mathscr{V}(q)$ имеет величину порядка $(2\pi)^{3/2}V_0a^3$ в области с радиусом $1/a$ и центром в начале координат. Во всех других точках она практически равна нулю. Подставляя эти значения функции в правую часть равенства (28), получим

$$\sigma_{\text{tot}}^{(B)}/4\pi a \approx 2\pi \left(V_0 m a^2/\hbar^2\right)^2, \text{ если } ka \ll 1,$$

$$\sigma_{\text{tot}}^{(B)}/4\pi a^2 \approx \frac{1}{2}\pi \left(V_0 m a/\hbar^2 k\right)^2, \text{ если } ka \gg 1.$$

Условия применимости борновского приближения имеют вид неравенства (41) в первом случае и неравенства (43) — во втором. В обоих случаях $\sigma_{\text{tot}}^{(B)}/4\pi a^2 \ll 1$.

Для справедливости борновского приближения выполнение неравенства (45) необходимо, но недостаточно. Бывает, что из-за резонансных эффектов, таких как эффект Рамзауера — Таунсенда при рассеянии медленных электронов на атомах, сечение рассеяния много меньше геометрического сечения и без быстрой сходимости борновского разложения. На практике резонансные эффекты легко распознать по их большой чувствительности к изменениям энергии налетающих частиц. С учетом этих фактов неравенство (45) является очень полезным критерием применимости борновского приближения.

§ 8. Упругое рассеяние электронов на атоме

В качестве приложения рассмотрим упругое рассеяние заряженной частицы на атоме. В принятой нами упрощенной трактовке атом рассматривается как распределение электрических зарядов. Вычислим в борновском приближении сечение рассеяния заряженной частицы на потенциале, создаваемом этим распределением зарядов. Метод даст правильное сечение, если мы будем работать в области, где борновское приближе-

ние справедливо (см. § 21). Будем считать для определенности, что налетающей частицей является электрон. Естественно было бы учесть эффект обмена налетающего электрона с электронами атома. Однако для энергий, при которых справедливо борновское приближение, такой эффект дает лишь малые поправки, поэтому мы им пренебрегаем.

Атом, по предположению, будем считать нейтральным. Обозначим атомный номер Z, а плотность электронов — $\rho(r)$

$$\int \rho \, dr = Z.$$

Электрический потенциал удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi e [Z\delta(r) - \rho(r)]. \tag{46}$$

На электрон действует потенциал

$$V(r) = -e\varphi(r),$$

который удовлетворяет аналогичному уравнению. Совершив преобразование Фурье, получаем соотношение

$$q^2\mathscr{V}(q) = 4\pi e^2 [Z - F(q)], \tag{47}$$

которое связывает функцию $\mathscr{V}(q)$ (определение (25) или (27)) и функцию

$$F(q) \equiv \int e^{-iqr}\rho(r)\, dr = q^{-1}\int_0^\infty \sin qr\, \rho(r)\, r\, dr. \tag{48}$$

Используя (47), получим сечение в борновском приближении (ур. (26))

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4[Z - F(q)]^2 m^2 e^4}{\hbar^4 q^4}. \tag{49}$$

Функция $F(q)$ называется *форм-фактором* плотности электронов. Ее общую форму можно легко получить из $\rho(r)$. В частности, имеем $F(0) = Z$. Пусть a — радиус атома, т. е. среднее расстояние электронов от ядра. Тогда функция F в существенном отлична от нуля лишь в области $q \lesssim 1/a$.

Например, если плотность электронов определена функцией

$$\rho(r) = \frac{Ze^{-r/a}}{2a^3},$$

то форм-фактор равен

$$F(q) = Z[1 + q^2a^2]^{-2}.$$

Когда $qa \gg 1$, т. е. для больших углов рассеяния,

$$\sin\frac{1}{2}\theta \gg \frac{1}{2ka},$$

форм-фактор практически исчезает [$F(q) \ll Z$] и формула (49) сводится к формуле Резерфорда, дающей сечение рассеяния только на ядре. Влияние электронов атома при этом пренебрежимо мало.

Их влияние становится существенным, если $qa \lesssim 1$. Следовательно, эффект экранировки значителен для малых углов

$$\sin \frac{1}{2}\theta \lesssim \frac{1}{2ka}. \tag{50}$$

Это согласуется с классической картиной, в которой малые углы рассеяния соответствуют большим прицельным параметрам.

В заключение проверим справедливость борновского приближения.

Радиус действия потенциала имеет порядок a. Оценка, использующая модель Томаса — Ферми, дает

$$a \approx \frac{Z^{-\frac{1}{3}}\hbar^2}{me^2}.$$

За среднее значение потенциала можно принять величину кулоновского потенциала ядра при $r = a$

$$V_0 \approx \frac{Ze^2}{a}.$$

В дальнейшем мы используем привычные обозначения

$$v = \frac{\hbar k}{m}, \quad \gamma = \frac{Ze^2}{\hbar v},$$

так что

$$ka = Z^{\frac{2}{3}}\gamma^{-1}.$$

Критерий (41) требует, чтобы $Z^{\frac{2}{3}} \ll 1$ и, следовательно, никогда не реализуется. Таким образом, борновское приближение оправдано лишь для достаточно больших энергий. В этой области ($ka \gg 1$), т. е. для $\gamma \ll Z^{\frac{2}{3}}$, критерий (43) требует $\gamma \ll 1$.

Итак, борновское приближение справедливо лишь при достаточно высоких энергиях, для которых $\gamma \ll 1$. В этом случае эффект экранировки существен лишь при очень малых углах и становится практически неощутимым вне области, определяемой неравенством (50), т. е. вне области $\theta \lesssim \gamma$. Экспериментальное определение форм-фактора возможно посредством точных измерений углового распределения при малых углах и больших энергиях и последующего использования формулы (49).

§ 9. Центральный потенциал. Вычисление сдвигов фаз

В случае центрального потенциала амплитуда $T_{a\to b}$ зависит только от угла рассеяния θ ($\cos\theta = \boldsymbol{k}_a\boldsymbol{k}_b/k^2$), и ее можно представить в виде разложения

$$T_{a\to b} = 16\pi^2 \sum_{l,m} T_l Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}}_b) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}_a) = 4\pi \sum_l (2l+1) T_l P_l(\cos\theta). \quad (51)$$

Коэффициенты T_l легко связать со сдвигами фаз, сравнивая это разложение с (X. 31):

$$T_l = -\hbar^2 e^{i\delta_l} \sin\delta_l / 2mk. \quad (52)$$

С другой стороны, разложение (51) можно получить непосредственно из интеграла $\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$, если разложить волны φ_b и $\psi_a^{(+)}$ по сферическим гармоникам. Учитывая соотношение ортонормировки сферических гармоник, легко провести интегрирование по углам и получить коэффициенты T_l в виде интегралов по радиусу. Полагая

$$\psi_a^{(+)} = 4\pi \sum_{l,m} i^l \psi_l(r) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}_a) Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}), \quad (53)$$

находим

$$T_l = \int_0^\infty j_l(kr)\, V(r)\, \psi_l(r)\, r^2\, dr. \quad (54)$$

Несложно показать (задача 4), что

$$\psi_l \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{1}{2} l\pi + \delta_l\right)/kr.$$

Сравнивая соотношения (52) и (54), получим интегральное представление $\sin\delta_l$, приведенное в § X. 17 (ур. (X. 73)). Оно сводится к борновской формуле для сдвигов фаз (ур. (X. 75)) в пределе, когда l-волна достаточно близка к свободной волне.

Из интегрального уравнения теории рассеяния таким же образом получаем интегральное уравнение для ψ_l. При этом удобно использовать следующее разложение функции Грина (задача 4):

$$\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} = 4\pi k \sum_{l,m} j_l(kr_<)\, h_l^{(+)}(kr_>)\, Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}')\, Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}), \quad (55)$$

где $r_<$ и $r_>$ означают соответственно меньший и больший из двух отрезков r и r'. Подставляя (53), (55) и разложение плоской

волны в интегральное уравнение (36), получаем интегральное уравнение для расходящейся парциальной волны

$$\psi_l(r) = j_l(kr) - (2mk/\hbar^2)\int_0^\infty j_l(kr_<)\, h_l^{(+)}(kr_>)\, V(r')\,\psi_l(r')\, r'^2\, dr'. \tag{56}$$

Итерирование этого уравнения дает ψ_l в виде разложения по степеням V.

§ 10. Функция Грина как оператор. Связь с резольвентой оператора H_0

В предыдущих параграфах функция Грина фигурировала как ядро интегрального уравнения. Ее можно рассматривать также как матричное представление некоторого оператора $G_0^{(+)}$, определяемого формулой

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r} | G_0^{(+)} | \boldsymbol{r}' \rangle. \tag{57}$$

Возьмем вектор $|u\rangle$ и обозначим соответствующую волновую функцию $u(\boldsymbol{r}) \equiv \langle \boldsymbol{r}|u\rangle$. Вектор $G_0^{(+)}|u\rangle$, который получается после действия на $|u\rangle$ оператора $G_0^{(+)}$, задается функцией

$$\langle \boldsymbol{r} | G_0^{(+)} | u \rangle = \int \mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\, u(\boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}'. \tag{58}$$

Аналогично определим оператор $G_0^{(-)}$

$$\mathcal{G}^*(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r} | G_0^{(-)} | \boldsymbol{r}' \rangle. \tag{59}$$

В силу симметрии $\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ по $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$ имеем

$$G_0^{(-)} = G_0^{(+)\dagger}. \tag{60}$$

Индекс 0 показывает, что эти операторы связаны с гамильтонианом свободной частицы H_0. Значки $(+)$ и $(-)$ относятся к асимптотическому поведению, которое с учетом асимптотической формы функции Грина (ур. (34)) имеет вид:

$$\langle \boldsymbol{r} | G_0^{(\pm)} | u \rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{\pm ikr}}{r}\int e^{\mp i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'} u(\boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}' \qquad (\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{r}/r). \tag{61}$$

Результат справедлив для любого вектора $|u\rangle$ с конечной нормой (последнее условие обеспечивает сходимость интеграла в правой части).

Отметим сильную сингулярность этих операторов. Если не все Фурье-компоненты $u(\boldsymbol{r})$, отвечающие волновым векторам длины k, обращаются в нуль, то $\langle \boldsymbol{r} | G_0^{(\pm)} | u \rangle$ на бесконечности

убывает недостаточно быстро для того, чтобы быть квадратично интегрируемой функцией. Другими словами, действие $G_0^{(+)}$ или $G_0^{(-)}$ на вектор гильбертова пространства дает функцию, не принадлежащую этому пространству. Следовательно, $G_0^{(+)}$ и $G_0^{(-)}$ не являются, вообще говоря, операторами в гильбертовом пространстве.

Однако мы можем определить их как пределы операторов в гильбертовом пространстве

$$G_0^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon \to 0+} \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \qquad (\varepsilon > 0). \tag{62}$$

В правой части формулы стоит резольвента $(z - H_0)^{-1}$ (см. гл. XVI, раздел III). Это ограниченный оператор в гильбертовом пространстве при всех значениях комплексной переменной z, за исключением собственных значений H_0, т. е. точек положительной вещественной полуоси. Поведение резольвенты в окрестности этих точек определено формулой (62). Если z стремится к E сверху от вещественной оси ($\operatorname{Im} z > 0$), то $(z - H_0)^{-1}$ стремится к $G_0^{(+)}$; а если стремится к E снизу от вещественной оси ($\operatorname{Im} z < 0$), то $(z - H_0)^{-1}$ стремится к $G_0^{(-)}$.

Докажем формулу (62). Рассмотрим диагональную матрицу $(z - H_0)^{-1}$ в $\{\boldsymbol{p}\}$-представлении и применим хорошо известное унитарное преобразование для получения матрицы этого оператора в $\{\boldsymbol{r}\}$-представлении

$$\langle \boldsymbol{r} | (z - H_0)^{-1} | \boldsymbol{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\boldsymbol{k}'(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r})} \left(z - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \right)^{-1} d\boldsymbol{k}'.$$

Это выражение легко проинтегрировать по углам. Вводя величину ζ, определяемую соотношением

$$z = \hbar^2 \zeta^2 / 2m, \quad \operatorname{Re} \zeta > 0,$$

и обозначая

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}',$$

находим

$$\langle \boldsymbol{r} | (z - H_0)^{-1} | \boldsymbol{r}' \rangle = \frac{m}{\pi^2 \hbar^2 R} \int_0^\infty \frac{k' \sin k' R}{\zeta^2 - k'^2} \, dk' =$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar^2 R} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k' e^{ik'R}}{\zeta^2 - k'^2} \, dk'.$$

Величина последнего интеграла не изменится, если замкнуть путь интегрирования дугой полуокружности, расположенной на бесконечности в верхней полуплоскости. Получившийся контур-

ный интеграл равен произведению $2\pi i$ на сумму вычетов в полюсах, расположенных в верхней полуплоскости. В данном случае имеется только один полюс. Его положение зависит от знака $\operatorname{Im}\zeta$, а значит, от знака $\operatorname{Im} z$ (рис. 17):

(а) $\operatorname{Im} z > 0$. Полюс при $k' = \zeta$ с вычетом $-\frac{1}{2} e^{i\zeta R}$;

(б) $\operatorname{Im} z < 0$. Полюс при $k' = -\zeta$ с вычетом $-\frac{1}{2} e^{-i\zeta R}$.

Следовательно,

$$\langle r | (z - H_0)^{-1} | r' \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \times \begin{cases} e^{i\zeta R}/R, & \text{если } \operatorname{Im} z > 0, \\ e^{-i\zeta R}/R, & \text{если } \operatorname{Im} z < 0. \end{cases}$$

Эти выражения необходимо сравнить с выражениями для $\mathcal{G}(r, r')$ (ур. (30)). Рассмотрим предел, когда z стремится к E,

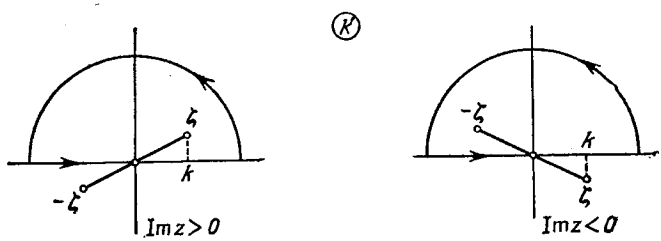


Рис. 17.

а ζ стремится к k. При переходе к пределу, в зависимости от знака ($\operatorname{Im} z > 0$ или $\operatorname{Im} z < 0$) мнимой части z, вычисленный выше матричный элемент стремится к $\mathcal{G}(r, r')$ или $\mathcal{G}^*(r, r')$. ■

Часто легче производить алгебраические преобразования с операторами, чем с задающими их матрицами. Поэтому зачастую предпочтительнее использовать операторы $G_0^{(+)}$ и $G_0^{(-)}$ вместо функций Грина. Тем не менее следует помнить, что это сингулярные операторы и обращение с ними требует известной осторожности [1]). Для полной строгости их следовало бы заме-

[1]) В частности, необходимо помнить, что G действует только на векторы с конечной нормой. Следующий пример иллюстрирует одну из ловушек, в которую можно попасть, забыв о сингулярности поведения этих операторов. Из соотношения (31) и симметричности функции Грина по r и r' имеем

$$(E - H_0)\, G_0^{(\pm)} = 1, \quad G_0^{(\pm)} (E - H_0) = 1.$$

Это означает, что при действии операторов, стоящих в левой части этих уравнений, на вектор с конечной нормой, мы получим тот же вектор. Однако если понимать эти соотношения буквально, то можно заключить, что оператор $E - H_0$ имеет обратный, что неверно, а $G_0^{(+)}$ и $G_0^{(-)}$ равны этому обратному оператору, а следовательно, равны друг другу, что также неверно.

нять регулярными операторами $(E - H_0 \pm i\varepsilon)^{-1}$ и аккуратно совершать предельный переход $\varepsilon \to 0$. Далее мы не будем придерживаться такого уровня строгости. Если же $G_0^{(\pm)}$ будут заменяться операторами $(E - H_0 \pm i\varepsilon)^{-1}$, то всегда будет подразумеваться, что ε — вещественное и положительное число. Формулы необходимо рассматривать в пределе $\varepsilon \to 0^+$.

Интегральные уравнения (36) и (37) теперь можно записать в виде

$$\psi_a^{(\pm)} = \varphi_a + G_0^{(\pm)} V \psi_a^{(\pm)} \tag{63}$$

или

$$\psi_a^{(\pm)} = \varphi_a + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V \psi_a^{(\pm)}. \tag{63'}$$

Итерируя эти уравнения, получаем борновское разложение

$$\psi_a^{(\pm)} = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (G_0^{(\pm)} V)^n\right] \varphi_a. \tag{64}$$

В этих выражениях символы ψ и φ означают либо стационарные волны, либо представляющие их кет-векторы.

Сопряженные уравнения получаем из данных заменой кет-векторов в обеих частях на соответствующие им сопряженные бра-векторы. В силу эрмитовости H_0

$$G_0^{(+)\dagger} = G_0^{(-)}, \quad G_0^{(-)\dagger} = G_0^{(+)}. \tag{65}$$

Тогда из формулы (63) получаем

$$\langle \psi_a^{(\pm)} | = \langle \varphi_a | + \langle \psi_a^{(\pm)} | V G_0^{(\mp)}, \tag{66}$$

а из формулы (64) получаем борновское разложение

$$\langle \psi_a^{(\pm)} | = \langle \varphi_a | \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (V G_0^{(\mp)})^n\right]. \tag{67}$$

Раздел II. ОБОБЩЕНИЕ НА ИСКАЖЕННЫЕ ВОЛНЫ

§ 11. Обобщенное борновское приближение

Может случиться, что потенциал $V(\boldsymbol{r})$ слишком велик для использования борновского приближения, но мы в состоянии точно решить задачу рассеяния для потенциала, близкого к V. Тогда удобно рассматривать разность между ними как возмущение, которое легко учесть, используя простое обобщение методов раздела I.

Пусть

$$V(r) = U_1(r) + W_1(r),$$
$$H_1 = H_0 + U_1(r). \tag{68}$$

Тогда имеем

$$H = H_1 + W_1, \tag{69}$$

где H_1 — невозмущенный гамильтониан, W_1 — возмущение. Будем считать, что U_1 и V стремятся к нулю быстрее, чем $1/r$ (обобщение на потенциалы $1/r$ будет сделано в § 15). Стационарные состояния H_1 предполагаются известными. Будем обозначать их буквой χ, а соответствующие амплитуды — буквой g. В дальнейшем мы следуем обозначениям § 2. Величины $\chi_a^{(+)}$ и $g_a^{(+)}$ определены соотношениями

$$H_1\chi_a^{(+)} = E\chi_a^{(+)}, \quad \chi_a^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ik_a r} + g_a^{(+)}(\Omega)\, e^{ikr}/r.$$

Все результаты раздела I, относящиеся к гамильтониану H, справедливы также и для H_1. В частности, можно определить матрицу перехода для столкновений при энергии E, описываемых гамильтонианом H_1. Обозначим ее $T^{(1)}$

$$T^{(1)}_{a\to b} \equiv \langle \varphi_b | T^{(1)} | \varphi_a \rangle \equiv \langle \varphi_b | U_1 | \chi_a^{(+)} \rangle = \langle \chi_b^{(-)} | U_1 | \varphi_a \rangle. \tag{70}$$

Вспомним, что в § 2 мы получили

$$g_b^{(-)*}(-\Omega_a) = g_a^{(+)}(\Omega_b) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} T^{(1)}_{a\to b}.$$

Интегральное представление для разности $T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}$ можно получить, используя (9). Пусть

$$\hat{U} = U_1, \quad U = V.$$

Тогда получим

$$\langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \psi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\left[f_a^{(+)}(\Omega_b) - g_b^{(-)*}(-\Omega_a)\right] =$$
$$= -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\left[f_a^{(+)}(\Omega_b) - g_a^{(+)}(\Omega_b)\right] = T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}. \tag{71}$$

Аналогично, если $\hat{U} = V$, $U = U_1$,

$$\langle \psi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle = T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}. \tag{72}$$

Из соотношений (71) и (72) следует

$$\langle \psi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle = \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \psi_a^{(+)} \rangle, \tag{73}$$

что является обобщением соотношения (18).

Любое из этих двух интегральных представлений можно использовать для построения теории возмущений. Соотношение

(71) дает

$$T_{a\to b} = T^{(1)}_{a\to b} + \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \psi_a^{(+)} \rangle. \tag{74}$$

Это — точное выражение для амплитуды перехода. Первый член дает амплитуду перехода при отсутствии W_1. Второе слагаемое дает поправку, обусловленную W_1. Для достаточно малых W_1 точная стационарная волна $\psi_a^{(+)}$ мало отличается от $\chi_a^{(+)}$ и может быть заменена последней в поправочном члене. Таким образом, получаем амплитуду перехода с точностью до первого порядка по возмущению W_1

$$T_{a\to b} \approx T^{(1)}_{a\to b} + \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle. \tag{75}$$

Это обобщение борновского приближения (см. ур. (23)). Отметим, что в интеграле возмущения

$$\langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle \equiv \int \chi_b^{(-)*}(\boldsymbol{r})\, W_1(\boldsymbol{r})\, \chi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r} \tag{76}$$

одновременно присутствуют стационарные решения, соответствующие уходящим и приходящим волнам.

Если взять $U_1 = 0$, то получим обычное борновское приближение. В общем случае, когда $U_1 \neq 0$, вычислить этот интеграл гораздо труднее, чем интеграл из формулы Борна. Ситуация становится отчасти проще, когда и U_1 и V сферически симметричны. Тогда можно использовать разложения (задача 4)

$$\chi_k^{(\pm)} = \frac{4\pi}{kr} \sum_{l,m} i^l e^{\pm i\eta_l} F_l(k; r)\, Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})\, Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}), \tag{77}$$

где $F_l(k; r)$ означает регулярное решение радиального уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U_1 + k^2\right] y = 0 \tag{78}$$

с асимптотическим поведением

$$F_l(k; r) \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr - \frac{1}{2} l\pi + \eta_l\right). \tag{79}$$

Здесь η_l — сдвиг фазы l-волны в потенциале U_1. Подставляя разложения $\chi_a^{(+)}$ и $\chi_b^{(-)}$ в интеграл (76) и интегрируя по углам, находим

$$\langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta)\, e^{2i\eta_l} \int_0^\infty F_l^2(k; r)\, W_1(r)\, dr.$$

Сходимость данного разложения тем лучше, чем меньше радиус действия W_1.

§ 12. Обобщение борновского разложения

Для того, чтобы найти поправки высших порядков, необходимо разложить $\psi_a^{(+)}$ по степеням W_1. По аналогии с методом раздела I найдем интегральное уравнение для $\psi_a^{(+)}$, итерируя которое получим искомое разложение.

Обозначим $G_1^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ функцию Грина гамильтониана H_1, соответствующую энергии $E = \hbar^2 k^2/2m$ и имеющую асимптотику расходящейся волны. По определению, это симметричная функция от $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$, удовлетворяющая дифференциальному уравнению в частных производных

$$(E - H_1)G_1^{(+)} \equiv \left[\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + k^2) - U_1\right] G_1^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'), \qquad (80)$$

с асимптотикой e^{ikr}/r, когда $r \to \infty$, а r' фиксировано. Согласно определению

$$\langle \boldsymbol{r} \,|\, G_1^{(+)} \,|\, \boldsymbol{r}' \rangle \equiv G_1^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}').$$

Эта матрица представляет некоторый оператор $G_1^{(+)}$. В следующем параграфе будет показано, что существует одна и только одна функция $G_1^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, обладающая этими свойствами.

Мы получим интегральное уравнение, следуя методу § 5 и используя эту функцию вместо свободной функции Грина. Уравнение Шредингера для $\psi_a^{(+)}$ запишем в виде

$$(E - H_1)\psi_a^{(+)} \equiv \left[\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + k^2) - U_1\right] \psi_a^{(+)} = W_1 \psi_a^{(+)}.$$

Заметим, что в силу ур. (80) функция

$$\psi_a^{(+)} - \int G_1^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\, W_1(\boldsymbol{r}')\, \psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}'$$

удовлетворяет «однородному уравнению»

$$(E - H_1)\chi = 0.$$

Поскольку эта функция имеет ту же асимптотическую форму, что и $\chi_a^{(+)}$, она с необходимостью равна $\chi_a^{(+)}$. Следовательно, $\psi_a^{(+)}$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\psi_a^{(+)} = \chi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) + \int G_1^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\, W_1(\boldsymbol{r}')\, \psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}'. \qquad (81)$$

Разложение $\psi_a^{(+)}$ по степеням W_1 легко получить из уравнения (81). Подставляя это разложение в «матричный элемент» правой части уравнения (74), получаем разложение $T_{a \to b}$ по степеням W_1. Если мы оставим только первые два члена этого разложения, то получим приближенное выражение (75).

Функция, комплексно сопряженная к $G_1^{(+)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, также является функцией Грина H_1 для энергии E. Это функция $G_1^{(-)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, которая ведет себя асимптотически как сходящаяся волна. Используя эти свойства, аналогичным методом можно ввести интегральное уравнение

$$\psi_a^{(-)} = \chi_a^{(-)} + \int G_1^{(-)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\, W_1(\boldsymbol{r}')\, \psi_a^{(-)}(\boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}'. \tag{82}$$

Можно также получить разложение $T_{a\to b}$ по степеням W_1, если в качестве исходного уравнения взять (82) и использовать свойство (73). Очевидно, что от этого результат не изменится.

§ 13. Функция Грина искаженных волн

Остается еще доказать существование функций Грина $G_1^{(+)}$ и $G_1^{(-)}$. Мы покажем, что при естественном обобщении уравнения (62) их можно определить как пределы резольвенты оператора H_1

$$G_1^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{1}{E - H_1 \pm i\varepsilon}. \tag{83}$$

Аналогично для каждого значения E можно связать с гамильтонианом H функции

$$G^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon}. \tag{84}$$

Рассмотрим вначале операторы $G^{(+)}$ и $G^{(-)}$ и покажем, что

$$(E - H)\, G^{(\pm)} = 1, \quad G^{(\pm)}(E - H) = 1. \tag{85}$$

Для произвольного вектора конечной нормы, очевидно, имеем

$$(E - H)\frac{1}{E - H + i\varepsilon}|u\rangle = |u\rangle - \frac{i\varepsilon}{E - H + i\varepsilon}|u\rangle. \tag{86}$$

Норма второго члена в правой части равна

$$N(\varepsilon) = \varepsilon^2 \langle u | \frac{1}{(E-H)^2 + \varepsilon^2} |u\rangle = \varepsilon \int |u(E')|^2 \frac{\varepsilon}{(E - E')^2 + \varepsilon^2}\, dE'.$$

Последнее выражение получается, если использовать представление, в котором диагонален гамильтониан H; $|u(E')|^2 dE'$ — норма компоненты $|u\rangle$ с энергией E'. При $\varepsilon \to 0$ в силу известного свойства δ-функции (ур. (А. 15в)) интеграл стремится к $\pi |u(E)|^2$. Таким образом, норма $N(\varepsilon)$ в этом пределе исчезает. Следовательно, при $\varepsilon \to 0$ уравнение (86) дает

$$(E - H)\, G^{(+)}|u\rangle = |u\rangle.$$

Поскольку это верно для любого $|u\rangle$ (*конечной нормы*[1])), то имеем

$$(E-H)\,G^{(+)}=1.$$

Остальные соотношения (85) можно доказать таким же способом. Аналогичным образом имеем

$$(E-H_1)\,G_1^{(\pm)}=1,\quad G_1^{(\pm)}(E-H_1)=1. \tag{87}$$

Уравнения (85) и (87) показывают, что $G^{(\pm)}$ и $G_1^{(\pm)}$ являются соответствующими функциями Грина операторов H и H_1 при энергии E. В $\{r\}$-представлении они сводятся к дифференциальным уравнениям в частных производных, характеризующим функции Грина; так, первое из уравнений (87) дает уравнение (80).

В предыдущем доказательстве мы аккуратно проделали предельный переход $\varepsilon\to 0^+$, поскольку он играл решающую роль. В дальнейшем мы не будем придерживаться такого уровня строгости и, следуя соглашению со стр. 310, часто будем заменять $G^{(\pm)}$ на $[E-H\pm i\varepsilon]^{-1}$, а $G_1^{(\pm)}$ — на $[E-H_1\pm i\varepsilon]^{-1}$, где ε — вещественная положительная бесконечно малая величина.

Поступая так же как в начале § XVI. 16, получим фундаментальные тождества

$$\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}-\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}=\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}\,V\,\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}= \tag{88а}$$

$$=\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}\,V\,\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}. \tag{88б}$$

Аналогичные тождества получаются и при замене H_1 и U_1 на H и V соответственно, или при замене H_1 и W_1 на H_0 и V.

Из тождеств (88) следуют соотношения[2]):

$$(1+G^{(\pm)}V)(1-G_0^{(\pm)}V)=1, \tag{89а}$$

$$(1-G_0^{(\pm)}V)(1+G^{(\pm)}V)=1. \tag{89б}$$

Теперь уравнение (63) можно записать в виде

$$[1-G_0^{(\pm)}V]\,\psi_a^{(\pm)}=\varphi_a.$$

Действуя оператором $(1+G^{(\pm)}V)$ на обе части этого уравнения и используя (89а) для упрощения левой части, получаем важную формулу

$$\psi_a^{(\pm)}=\Big(1+\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}\,V\Big)\,\varphi_a. \tag{90}$$

---

[1]) Здесь полностью применимы замечания сноски на стр. 310.

[2]) Из этих тождеств нельзя сделать вывод, что $(1+G^{(\pm)}V)$ и $(1-G_0^{(\pm)}V)$ обратны друг к другу или, что каждый из них имеет обратный. См. сноску к §10.

Так как H эрмитов, то, очевидно, имеем

$$G^{(\pm)\dagger} = G^{(\mp)}. \tag{91}$$

Следовательно, сопряженным уравнением к уравнению (90) будет

$$\langle \psi_a^{(\pm)} | = \langle \varphi_a | \left(1 + V \frac{1}{E - H \mp i\varepsilon}\right). \tag{92}$$

Теперь мы в состоянии получить асимптотическое поведение $G^{(+)}$ и $G^{(-)}$ из асимптотического поведения $G_0^{(+)}$ и $G_0^{(-)}$ соответственно. Если вектор $|u\rangle$ достаточно быстро убывает на бесконечности, то из (88б) имеем

$$G^{(\pm)} | u\rangle = G_0^{(\pm)} | \mathscr{V}\rangle,$$

где

$$| \mathscr{V}\rangle = (1 + VG^{(\pm)}) | u\rangle.$$

Если вектор $|\mathscr{V}\rangle$ также достаточно быстро убывает на бесконечности [1]), то можно использовать уравнение (61). Получим

$$\langle \boldsymbol{r} | G^{(\pm)} | u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \langle \varphi_{\pm \boldsymbol{k}} | \mathscr{V}\rangle \quad (\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{r}/r). \tag{93}$$

Оператор $G^{(+)}$, действуя на вектор гильбертова пространства, будет давать в общем случае вектор, который ведет себя асимптотически, как чисто расходящаяся волна, а оператор $G^{(-)}$ — вектор, ведущий себя асимптотически, как чисто сходящаяся волна. Заменяя $|\mathscr{V}\rangle$ в правой части (93) его определением и используя тот факт (ур. (91)), что

$$\langle \varphi_{\pm \boldsymbol{k}} | (1 + VG^{(\pm)}) = \langle \psi_{\pm \boldsymbol{k}}^{(\mp)} |,$$

находим

$$\langle \boldsymbol{r} | G^{(\pm)} | u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \langle \psi_{\pm \boldsymbol{k}}^{(\mp)} | u\rangle. \tag{94}$$

Следует отметить, что в асимптотическом выражении для $G^{(+)}$ появилась именно волна $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$, а в выражении для $G^{(-)}$ — волна $\psi_{-\boldsymbol{k}}^{(+)}$.

Операторы $G_1^{(+)}$ и $G_1^{(-)}$ обладают аналогичными свойствами, а именно, их асимптотическое поведение таково:

$$\langle \boldsymbol{r} | G_1^{(\pm)} | u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \langle \chi_{\pm \boldsymbol{k}}^{(\mp)} | u\rangle \quad (\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{r}/r). \tag{95}$$

[1]) Последующие рассуждения несправедливы, если на бесконечности V ведет себя как $1/r$.

Если U_1 сферически симметрично, то функции Грина $G_1^{(\pm)}$ легко выразить в терминах решений радиального уравнения (78). Находим (задача 4)

$$\langle \boldsymbol{r} \mid G_1^{(\pm)} \mid \boldsymbol{r}' \rangle = -\frac{2m}{\hbar^2 k} \frac{1}{rr'} \sum_{l,m} e^{\pm i\eta_l} F_l(k; r_<) u_l^{(\pm)}(k; r_>) Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}') Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}), \tag{96}$$

где $r_<$ и $r_>$ — соответственно меньшая и большая из двух длин r и r', а η_l и F_l были определены в § 11. Функции $u_l^{(\pm)}$ представляют собой нерегулярные решения уравнения (78), которые имеют асимптотическое поведение:

$$u_l^{(\pm)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{\pm i\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right)}.$$

Явные выражения (96), как легко видеть, имеют характерные для $G_1^{(+)}$ и $G_1^{(-)}$ свойства.

§ 14. Приложения. Определение и формальные свойства T-матрицы

Используя формальные свойства функций Грина, приведенные в § 13, можно получить большинство предыдущих результатов посредством простых алгебраических преобразований. Преимущество такой процедуры состоит в том, что с одной стороны, она формально очень проста, а с другой — легко поддается обобщению.

В частности, так получаются интегральные уравнения (81) и (82), которые можно записать в виде

$$\psi_a^{(\pm)} = \chi_a^{(\pm)} + \frac{1}{E - H_1 \pm i\varepsilon} W_1 \psi_a^{(\pm)}. \tag{97}$$

Сравнивая асимптотическое поведение обеих частей уравнения (97), получаем соотношение (74).

Можно также показать, что справедливы соотношения

$$\chi_a^{(\pm)} = \left[1 + \frac{1}{E - H_1 \pm i\varepsilon} U_1\right] \varphi_a, \tag{98}$$

$$\psi_a^{(\pm)} = \left[1 + \frac{1}{E - H \pm i\varepsilon} W_1\right] \chi_a^{(\pm)}, \tag{99}$$

доказательство которых предоставляем читателю.

Можно также привести формальное определение T. Соотношение (20) дает его матричные элементы только между плоскими волнами одинаковой энергии E. Принимая во внимание уравнение (90), это соотношение можно записать в виде

$$\langle \varphi_b \mid T \mid \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b \mid \left[V + V \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V\right] \mid \varphi_a \rangle. \tag{100}$$

Обобщим это соотношение:

$$T = V + V\frac{1}{E - H + i\varepsilon}V. \tag{101}$$

В этом определении E играет роль параметра, а T равно значению операторнозначной функции комплексной переменной z

$$T(z) = V + V\frac{1}{z - H}V$$

в пределе, когда z стремится к вещественному значению E, оставаясь в верхней полуплоскости ($\operatorname{Im} z > 0$).

Преобразуя правую часть уравнения (101) с помощью тождеств (88а) и (88б), легко получить следующие интегральные уравнения для оператора T:

$$T = V + T\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}V, \tag{102а}$$

$$T = V + V\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}T. \tag{102б}$$

На практике обычно имеют дело с матричными элементами T между свободными волнами с энергией E, в частности, между плоскими волнами с энергией E.

В качестве иллюстрации докажем соотношение микрообратимости (21), используя только формальные свойства T. Обозначим через K (антилинейный) оператор обращения времени. Гамильтониан H_0, очевидно, инвариантен относительно обращения времени и, более того,

$$\varphi_{Ka} = K\varphi_a, \quad \varphi_{Kb} = K\varphi_b. \tag{103}$$

Предположим, что H также обладает свойством инвариантности

$$KHK^{\dagger} = H,$$

т. е.

$$KVK^{\dagger} = V.$$

Из определений (84) и (101) последовательно получаем

$$KG^{(+)}K^{\dagger} = G^{(-)} = G^{(+)\dagger}$$

и

$$KTK^{\dagger} = T^{\dagger}. \tag{104}$$

Приведенный закон преобразования оператора T относительно обращения времени позволяет заключить, что

$$T_{Kb\to Ka} = \left(\langle\varphi_a|K^{\dagger}\right)T\left(K|\varphi_b\rangle\right) = \langle\varphi_a|\left(K^{\dagger}TK\right)|\varphi_b\rangle^* =$$
$$= \langle\varphi_b|\left(K^{\dagger}T^{\dagger}K\right)|\varphi_a\rangle = \langle\varphi_b|T|\varphi_a\rangle = T_{a\to b}.$$

Это есть соотношение микрообратимости.

§ 15. Замечание о потенциалах $1/r$

В предыдущих разделах всюду предполагалось, что потенциалы $V(r)$, $U_1(r)$ и $W_1(r)$ убывают на бесконечности быстрее, чем $1/r$. Это является необходимым условием того, чтобы различные волновые функции Грина, которые мы использовали, имели нужное асимптотическое поведение. Однако те же методы, с незначительной модификацией, могут быть применены в случае, когда оба потенциала, $V(r)$ и $U_1(r)$, ведут себя, как $1/r$ в предположении, что их разность $W_1(r)$ стремится к нулю быстрее, чем $1/r$. Асимптотики отличаются только присутствием в показателе экспоненты дополнительного слагаемого, пропорционального $\ln 2kr$. Асимптотики u_l и F_l претерпевают те же изменения. За исключением этих отличий, методы и результаты остаются в существенном теми же. В частности, верны определения (83) и (84) функций Грина, интегральное уравнение (97), основное уравнение (74), а также формула (75) в пределе, когда W_1 можно рассматривать как малое возмущение.

Раздел III. СЛОЖНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ И БОРНОВСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

§ 16. Общие понятия. Сечения

В данном разделе [1]) мы распространим исследования предыдущих разделов на случай столкновения любых двух частиц. Здесь мы понимаем слово «частица» в его широком смысле, считая, что частица может иметь сложную внутреннюю структуру. Для таких элементарных частиц как электроны, протоны, нейтроны внутренние переменные сводились только к спиновым переменным. Однако мы будем рассматривать также сложные (составные) частицы — ионы, атомы, атомные ядра и т. д., которые состоят из нескольких элементарных частиц.

Пусть столкновение происходит между двумя частицами A и X, элементарными или сложными. Тогда возможны три типа процессов:

(а) *упругое рассеяние* — внутренние квантовые состояния частиц не меняются после столкновения

$$A + X \to A + X;$$

(б) *неупругое рассеяние* — кроме отклонения, в результате столкновения происходит изменение внутренних состояний ча-

---

[1]) Более подробное объяснение используемой в данном разделе терминологии см. в книгах: *C. Bloch.* Cours sur la Théorie des réactions nucléaires, Chap. I—III. Saclay (1955—1956); *Дж. Блатт, В. Вайскопф.* Теоретическая ядерная физика. М., ИЛ., 1954.

стиц [1]), например,

$$A + X \to A' + X';$$

(в) *столкновение с перераспределением* (иначе говоря, *реакция*), когда частицы A и X в процессе столкновения обмениваются некоторыми из составляющих их элементарных частиц. Другими словами, система $(A + X)$ переходит в две или большее число частиц, отличных от исходных. Например, в процессе столкновения появляются частицы B и Y, отличные от A и X,

$$A + X \to B + Y.$$

Химическая реакция представляет собой рассеяние молекул с перераспределением, ядерная реакция есть столкновение с перераспределением между атомными ядрами. В дальнейшем будет приведено несколько таких примеров.

Столкновение двух частиц характеризуется такой величиной, как сечение. Для упругого рассеяния определение этой величины уже было дано в главе X (§ 2). В общем случае *сечение рассеяния для процесса определенного типа в данном столкновении равно числу событий этого типа в единицу времени от одного центра мишени при единичном потоке падающих на мишень частиц.*

Чтобы определить однозначно сечение для столкновения частиц A и X, необходимо точно задать начальные условия столкновения — квантовые состояния и относительные скорости этих частиц. Обычно в эксперименте одна из скоростей равна нулю, скажем, скорость частицы X. Мишень из частиц типа X практически покоится, она бомбардируется моноэнергетическим пучком частиц типа A. Однако движение центра масс можно полностью отделить от относительного движения. Простое кинематическое рассмотрение позволяет установить связь сечений, которые соответствуют начальным условиям, отличающимся выбором разных систем отсчета. В частности, обобщая очевидным образом метод § X.7 (см. задачу X.2), мы можем получить связь сечений в лабораторной системе (скорость частицы X равна нулю) с сечениями в системе центра масс (скорость центра масс равна нулю). В дальнейшем рассматриваются только сечения в системе центра масс.

Энергию в системе центра масс будем обозначать буквой E, гамильтониан относительного движения — H (прибавляя энергию центра масс, получаем полный гамильтониан).

---

[1]) Таковым может быть простой переворот спина. Принятое здесь определение несколько отличается от обычного, согласно которому процесс рассеяния считается неупругим или упругим в зависимости от того, изменилась ли внутренняя энергия частиц или нет.

§ 17. Каналы

Важную роль при изучении сложных столкновений играет понятие *канала реакции*. Так называют каждую возможную моду деления системы в результате столкновения. Одна из таких мод — сами две сталкивающихся частицы — называется *входящим каналом*. При упругом рассеянии две частицы остаются во входящем канале. При двух других типах столкновений выходящий канал отличен от входящего. Это будет неупругое рассеяние или рассеяние с перераспределением в зависимости от того, имеем ли мы в выходящем канале реакции те же частицы, что и во входящем, или другие. Каждый канал будем обозначать какой-либо греческой буквой.

С каналом можно связать некоторое число параметров. Для простоты будем всегда предполагать, что каналы реакции состоят только из двух частиц.

Рассмотрим канал γ, который содержит частицы C и Z. Вектор $\boldsymbol{r}_\gamma$ определяет положение частицы C по отношению к Z, другими словами, $\boldsymbol{r}_\gamma = \boldsymbol{r}_C - \boldsymbol{r}_Z$, где $\boldsymbol{r}_C$ и $\boldsymbol{r}_Z$ — координаты центров масс C и Z. Так же определяется относительный импульс $\boldsymbol{p}_\gamma$ и приведенная масса

$$M_\gamma = \frac{M_C M_Z}{M_C + M_Z}.$$

Кинетическая энергия в канале γ равна $\boldsymbol{p}_\gamma^2/2M_\gamma$.

Волновая функция φ_γ, которая нормирована на единицу и описывает внутреннее квантовое состояние частиц канала, равна произведению волновых функций φ_C и φ_Z частиц C и Z. Если обозначить гамильтониан частиц h_C и h_Z, то получим равенства

$$h_C\varphi_C = e_C\varphi_C, \qquad h_Z\varphi_Z = e_Z\varphi_Z,$$
$$\varphi_\gamma = \varphi_C\varphi_Z, \qquad e_\gamma = e_C + e_Z,$$

где e_γ — полная внутренняя энергия частиц канала γ.

Пусть V_γ — потенциал взаимодействия частиц C и Z, т. е. сумма потенциалов взаимодействия между каждой элементарной частицей, содержащейся в C, и каждой элементарной частицей, содержащейся в Z. В пределе $r_\gamma \to \infty$ значение V_γ стремится к нулю. Мы будем всегда считать, что V_γ убывает быстрее, чем $1/r_\gamma$. Как отмечалось в § 15, обобщение результатов на потенциалы вида $1/r_\gamma$ не представляет серьезных трудностей.

Гамильтониан системы равен

$$H = H_\gamma + V_\gamma, \tag{105}$$

где

$$H_\gamma = h_C + h_Z + \boldsymbol{p}_\gamma^2/2M_\gamma. \tag{106}$$

§ 18. Вычисление сечений. T-матрицы

В рассмотренном выше столкновении входящим является канал $(A + X)$, который мы обозначим буквой α. Чтобы фиксировать начальные условия, нужно задать еще относительный импульс $\hbar \boldsymbol{k}_a$ частиц в начальном состоянии. Полные начальные условия обозначим индексом $a \equiv (\alpha, \boldsymbol{k}_a)$. Имеем

$$E = e_\alpha + \hbar^2 k_a^2 / 2M_\alpha. \tag{107}$$

Допустим, что возможна реакция $A + X \to B + Y$. В этом случае канал $(B + Y)$ или β называют *открытым каналом*. В силу закона сохранения энергии частицы канала β имеют вполне определенную величину относительного импульса $\hbar k_b$

$$E = e_\beta + \hbar^2 k_b^2 / 2M_\beta. \tag{108}$$

Для того чтобы канал β был открытым, очевидно, необходима положительность $E - e_\beta$.

С каждым набором начальных условий a можно связать плоскую волну

$$\Phi_a = \varphi_\alpha e^{i \boldsymbol{k}_a \boldsymbol{r}_\alpha} \tag{109}$$

и две стационарных волны, $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_a^{(-)}$. Волна $\Psi_a^{(+)}$ есть стационарное решение H, отвечающее энергии E и имеющее во входящем канале асимптотическое поведение ($e^{i \boldsymbol{k}_a \boldsymbol{r}_\alpha}$ + расходящаяся волна), а во всех других открытых каналах — поведение чисто расходящейся волны. $\Psi_a^{(-)}$ определяется аналогичным образом, но со сходящимися волнами. В соответствии с этими определениями имеем равенства

$$H_\alpha \Phi_a = E \Phi_a, \tag{110}$$

$$H \Psi_a^{(\pm)} = E \Psi_a^{(\pm)}, \tag{111}$$

а для любого открытого канала γ (мы предполагаем, что ни один из них не содержит более двух частиц)

$$\Psi_a^{(\pm)} \underset{r_\alpha \to \infty}{\sim} \varphi_\alpha \left[e^{i \boldsymbol{k}_a \boldsymbol{r}_\alpha} + f_{a\alpha}^{(\pm)} (\Omega_\alpha) \, e^{\pm i k_a r_\alpha} / r_\alpha \right],$$

$$\Psi_a^{(\pm)} \underset{r_\gamma \to \infty}{\sim} \varphi_\gamma f_{a\gamma}^{(\pm)} (\Omega_\gamma) \, e^{\pm i k_c r_\gamma} / r_\gamma \qquad (\gamma \neq \alpha). \tag{112}$$

Не вдаваясь в обсуждения, мы считаем, что стационарные решения $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_a^{(-)}$ существуют.

Сечения рассеяния непосредственно связаны с асимптотическим поведением $\Psi_a^{(+)}$. Пусть $d\sigma_{a \to b} / d\Omega_\beta$ — сечение испускания

частицы B в направлении Ω_b. Находим

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega_\beta} = \frac{v_b}{v_a} \left| f^{(+)}_{a\beta}(\Omega_b) \right|^2, \tag{113}$$

где $v_a = \hbar k_a / M_\alpha$ — скорость налетающей частицы, а $v_b = \hbar k_b M_\beta$ — скорость частицы B, появившейся в результате столкновения. Вывод этой формулы аналогичен приведенному в §§ 4—6 главы X [1]) и предоставляется читателю.

Обобщая рассуждения § 3, мы приходим к описанию процесса с энергией E посредством матрицы перехода T:

$$T_{a\to b} \equiv \langle b | T | a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta} f^{(+)}_{a\beta}(\Omega_b). \tag{114}$$

Используя формулы (112) и (113), получаем

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega_\beta} = \frac{2\pi}{\hbar v_a} |T_{a\to b}|^2 \rho_b(E), \tag{115}$$

где $\rho_b(E)$ задает плотность конечных состояний в соответствии с определением § XVII. 5. Полученная формула представляет обобщение формулы (19′). $T_{a\to b}$ есть амплитуда перехода $a \to b$.

§ 19. Интегральные представления амплитуды перехода

Чтобы найти интегральные представления для $T_{a\to b}$, нужно несколько модифицировать соотношение (9).

Пусть H и $\hat{H}$ — два возможных гамильтониана исследуемой квантовой системы. H и $\hat{H}$ имеют одну и ту же кинетическую энергию, но их потенциальные энергии могут быть различны. Мы будем считать, что отличие сводится к членам, которые убывают на бесконечности быстрее, чем $1/r$. Стационарные решения для H и $\hat{H}$ с энергией E обозначим Ψ и $\hat{\Psi}$ соответственно. Отметим, что ряд каналов может быть открыт для столкновений, описываемых H, и закрыт для столкновений, описываемых $\hat{H}$, и наоборот. Пусть канал β открыт для столкновений, которые описываются гамильтонианом $\hat{H}$. Следовательно, существует решение $\hat{\Psi}^{(-)}_b$, отвечающее начальным условиям $b \equiv (\beta, k_b)$. Оно удовлетворяет уравнению

$$\hat{H}\hat{\Psi}^{(-)}_b = E\hat{\Psi}^{(-)}_b \tag{116}$$

[1]) Этот результат можно также получить, используя рассуждения § X. 2: сечение равно отношению потока частиц B, $v_b \left| f^{(+)}_{a\beta}(\Omega_b) \right|^2$ к падающему потоку v_a.

и для любого открытого канала δ (напомним, что по предположению любой канал имеет не более двух частиц) имеет асимптотики

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_b^{(-)} &\underset{r_\beta\to\infty}{\sim} \varphi_\beta\left[e^{ik_b r_\beta} + \hat{f}_{b\beta}^{(-)}(\Omega_\beta)\, e^{-ik_b r_\beta}/r_\beta\right]\\ \hat{\Psi}_b^{(-)} &\underset{r_\delta\to\infty}{\sim} \varphi_\delta \hat{f}_{b\delta}^{(-)}(\Omega_\delta)\, e^{-ik_d r_\delta}/r_\delta \qquad (\delta \neq \beta).\end{aligned} \tag{117}$$

Можно показать, что

$$\left\langle \hat{\Psi}_b^{(-)} \middle| (H - \hat{H}) \middle| \Psi_a^{(+)} \right\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta} f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b) + \frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha} \hat{f}_{b\alpha}^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{118}$$

Метод доказательства тот же, что и в случае соотношения (9). Умножая уравнение (111) на $\hat{\Psi}_b^{(-)*}$, а комплексно сопряженное к уравнению (116) — на $\Psi_a^{(+)}$ и вычитая результаты друг из друга, получаем

$$\left[\hat{\Psi}_b^{(-)*}(H\Psi_a^{(+)}) - (\hat{H}\hat{\Psi}_b^{(-)})^* \Psi_a^{(+)}\right] + \hat{\Psi}_b^{(-)*}(H - \hat{H})\Psi_a^{(+)} = 0.$$

К соотношению (118) приходим после суммирования по спиновым переменным и интегрирования по всему конфигурационному пространству. Несмотря на то, что оператор H эрмитов, вклад от выражения в квадратных скобках может быть отличен от нуля, поскольку ни одно из решений Ψ, $\hat{\Psi}$ не имеет конечной нормы. Чтобы сосчитать этот вклад, вычислим вначале интеграл по конечному объему конфигурационного пространства, а затем рассмотрим предел этого интеграла, когда объем стремится к бесконечности. Используя теорему Грина, интеграл по объему можно преобразовать в интеграл по поверхности [1]). Последний имеет вид суммы, слагаемые которой отвечают различным открытым каналам ν, общим для Ψ и $\hat{\Psi}$,

$$\left\langle \hat{\Psi}_b^{(-)} \middle| (H - \hat{H}) \middle| \Psi_a^{(+)} \right\rangle = \sum_\nu \frac{\hbar^2}{2M_\nu} \lim_{R_\nu\to\infty} \left\{\hat{\Psi}_a^{(-)*}, \Psi_b^{(+)}\right\}_\nu. \tag{119}$$

---

[1]) Напомним, что существует много способов выделения центра масс, однако величина

$$x \equiv \left(\sum_j M_j r_j^2\right)^{1/2}$$

не зависит от способа. Здесь $r_1, r_2, \ldots, r_j, \ldots$ — относительные координаты, отвечающие выбранному способу, а $M_1, M_2, \ldots, M_j, \ldots$ — соответствующие массы (см. § IX. 13). Упомянутый объем интегрирования можно определять условием $x \leqslant X$, где X — положительная константа, которая велика по сравнению с радиусом взаимодействия. Используя теорему Грина, можно преобразовать интеграл по объему в интеграл по гиперповерхности $x = X$, который при $X \to \infty$ стремится к выражению, стоящему в правой части формулы (119).

Символ $\{\ldots\}_\nu$ аналогичен обозначению, которое было использовано в § 2. По определению

$$\{F_1, F_2\}_\nu = \left\langle \int \left(F_1 \frac{\partial F_2}{\partial r_\nu} - F_2 \frac{\partial F_1}{\partial r_\nu} \right) \Big|_{r_\nu = R_\nu} R_\nu^2 \, d\Omega_\nu \right\rangle,$$

где символ $\left\langle \int \ldots d\Omega_\nu \right\rangle$ означает суммирование или интегрирование по всем переменным кроме относительного расстояния r_ν. Различные слагаемые в правой части равенства (119) можно вычислить, подставляя вместо Ψ, $\hat{\Psi}$ и их радиальных производных соответствующие асимптотические выражения (112) и (117). Для любого канала, отличного от α и β, $\Psi_a^{(+)}$ представляет собой чисто расходящуюся волну, а $\Psi_b^{(-)}$ — чисто сходящуюся волну, следовательно, $\{\ldots\}_\nu$ асимптотически стремится к нулю. Для каналов α и β получаем отличный от нуля вклад, поскольку в одном из двух асимптотических выражений присутствует плоская волна. Вычисление аналогично выполненному в § 2 и приводит к двум членам, стоящим в правой части соотношения (118).

Важное соотношение (118) можно преобразовать к более удобному виду. Для этого выпишем (118) в частном случае, когда $\hat{H} = H$. Левая часть обращается в нуль, и мы имеем

$$\frac{1}{M_\beta} f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b) = \frac{1}{M_\alpha} f_{b\alpha}^{(-)*}(-\Omega_a).$$

Сравнивая это равенство с определением T (ур. (114)), получаем эквивалентное определение

$$\langle b | T | a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha} f_{b\alpha}^{(-)*}(-\Omega_a). \qquad (114')$$

Эти же определения справедливы и для матрицы перехода $\hat{T}$, связанной с гамильтонианом $\hat{H}$. Таким образом, соотношение (118) можно также записать так:

$$\langle b | T | a \rangle = \langle b | \hat{T} | a \rangle + \langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle. \qquad (120)$$

Именно в этом виде мы и будем его использовать.

Это соотношение выполняется и в случае, когда канал α закрыт для волны $\hat{\Psi}_b^{(-)}$, если положить $\langle b | \hat{T} | a \rangle = 0$. Оно выполняется также в случае, когда канал β закрыт для $\Psi_a^{(+)}$, если положить $\langle b | T | a \rangle = 0$.

В частности, если $\hat{H} = H_\beta$, то $\hat{\Psi}_\beta^{(-)}$ сводится к плоской волне Φ_β и поскольку $H - H_\beta = V_\beta$, соотношение (120) дает

$$\langle b | T | a \rangle = \langle \Phi_b | V_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle. \qquad (121)$$

Заменяя H на H_α и $\hat{H}$ на H, получаем

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Psi_b^{(-)}|V_\alpha|\Phi_a\rangle. \tag{122}$$

Выведенные нами соотношения справедливы для любых типов столкновений: упругого рассеяния ($\alpha = \beta$), неупругого рассеяния ($\alpha \neq \beta$, $V_\alpha = V_\beta$) или рассеяния с перераспределением ($V_\alpha \neq V_\beta$).

§ 20. Борновское приближение и его обобщения

Подставляя в правую часть равенства (121) вместо $\Psi_a^{(+)}$ плоскую волну Φ_a, получаем *амплитуду перехода $a \to b$ в борновском приближении* (см. ур. (23))

$$T_{a\to b} \approx T_{a\to b}^{(B)} = \langle \Phi_b|V_\beta|\Phi_a\rangle. \tag{123}$$

То же приближение получается после подстановки в правую часть (122) плоской волны Φ_b вместо $\Psi_b^{(-)}$. Действительно, если мы заменим H на H_α и $\hat{H}$ на H_β, то из соотношения (120) получим

$$\langle \Phi_b|V_\beta|\Phi_a\rangle = \langle \Phi_b|V_\alpha|\Phi_a\rangle. \tag{124}$$

Можно также записать

$$T_{a\to b}^{(B)} = \langle \Phi_b|V_\alpha|\Phi_a\rangle. \tag{124'}$$

Переход от (121) к (123) оправдан, если $\Psi^{(+)}$ мало отличается от Φ_a в области, где отличен от нуля потенциал V_β. Точно так же для перехода от (122) к (124') достаточно, чтобы $\Psi_b^{(-)}$ мало отличалось от Φ_b в области, где сосредоточен потенциал V_α. Эти два условия эквивалентны, хотя на первый взгляд кажутся различными. Оба условия предполагают, что $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_b^{(-)}$ можно заменить плоскими волнами Φ_a и Φ_b соответственно.

Более точные выражения получатся, если вместо плоских волн использовать волновые функции, которые лучше аппроксимируют стационарные решения $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_b^{(-)}$.

Допустим, например, что V_α можно представить в виде

$$V_\alpha = U_\alpha + W_\alpha$$

и что известны стационарные решения для гамильтониана $H_\alpha + U_\alpha$, отвечающие энергии E. Обозначим эти решения X, а соответствующую матрицу перехода — $T^{(X)}$. В частности, $X_a^{(+)}$ будет обозначать решение с расходящимися волнами, отвечаю-

щее начальным условиям a, и мы имеем

$$T^{(X)}_{a\to b} = \langle \Phi_b | (H_\alpha + U_\alpha - H_\beta) | X_a^{(+)} \rangle = \langle \Phi_b | (V_\beta - W_\alpha) | X_a^{(+)} \rangle. \quad (125)$$

Если W_α достаточно мало, то $X_a^{(+)}$ будет мало отличаться от $\Psi_a^{(+)}$.

Точно так же предположим, что V_β можно представить в виде

$$V_\beta = U_\beta + W_\beta$$

и известны стационарные решения для гамильтониана $H_\beta + U_\beta$, отвечающие энергии E. Будем обозначать эти решения Ξ, а соответствующую матрицу перехода — $T^{(\Xi)}$. В частности, $\Xi_b^{(-)}$ будет решение со сходящимися волнами, отвечающее начальным условиям b, и мы имеем

$$T^{(\Xi)}_{a\to\beta} = \langle \Xi_b^{(-)} | (V_\alpha - W_\beta) | \Phi_a \rangle. \quad (126)$$

Если W_β достаточно мало, то $\Xi_b^{(-)}$ будет мало отличаться от $\Psi_b^{(-)}$.

В силу соотношения (120) имеем

$$T_{a\to b} = T^{(X)}_{a\to b} + \langle \Psi_b^{(-)} | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle = \quad (127)$$

$$= T^{(\Xi)}_{a\to b} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle. \quad (128)$$

Эти два выражения для $T_{a\to b}$ являются точными. Заменяя в первом из них $\Psi_b^{(-)}$ на $\Xi_b^{(-)}$ или $\Psi_a^{(+)}$ на $X_a^{(+)}$ — во втором, получаем приближенные выражения

$$T_{a\to b} \approx T^{(X)}_{a\to b} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle \approx \quad (129)$$

$$\approx T^{(\Xi)}_{a\to b} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\beta | X_a^{(+)} \rangle. \quad (130)$$

Хотя формально эти выражения различны при $W_\alpha \neq W_\beta$, они всегда равны друг другу, что легко увидеть, если воспользоваться соотношением (120) с $H_\alpha + U_\alpha$ вместо H и $H_\beta + U_\beta$ вместо H.

Данные формулы представляют собой обобщение борновского приближения (см. ур. (75)). Они точнее тех, которые получаются после простой замены $\Psi_a^{(+)}$ в выражении (121) на $X_a^{(+)}$. Действительно, поскольку справедливо равенство (ур. (125))

$$\langle \Phi_b | V_\beta | X_a^{(+)} \rangle = T^{(X)}_{a\to b} + \langle \Phi_b | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle,$$

последнее приближение сводится к замене $\Psi_b^{(-)}$ в выражении (127) на Φ_b, а не на $\Xi_b^{(-)}$. По этим же причинам формулы (129) и (130) точнее тех, которые получаются после замены $\Psi_b^{(-)}$ на $\Xi_b^{(-)}$ в правой части равенства (122).

§ 21. Рассеяние быстрых электронов атомом

В качестве иллюстрации собственно борновского приближения рассмотрим рассеяние быстрых электронов атомом.

Ядро атома будем считать бесконечно тяжелым и расположенным в начале координат. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + h + V(\boldsymbol{r}, A).$$

Первое слагаемое — кинетическая энергия налетающего электрона, второе — гамильтониан атома, третье слагаемое представляет собой энергию взаимодействия

$$V(\boldsymbol{r}, A) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|}, \tag{131}$$

где $\boldsymbol{r}$ — координаты налетающего электрона, а $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_Z$ — координаты электронов атома. Пусть

$$\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n, \ldots —$$

собственные функции гамильтониана h, а

$$e_0, e_1, \ldots, e_n, \ldots —$$

соответствующие собственные значения.

Рассмотрим процесс неупругого рассеяния, когда импульс электрона меняется от $\hbar\boldsymbol{k}_0$ до $\hbar\boldsymbol{k}_n$, а атом переходит из основного состояния φ_0 в возбужденное состояние φ_n. В силу закона сохранения энергии имеем

$$\hbar^2 (k_0^2 - k_n^2) = 2m (e_n - e_0).$$

Обозначим переданный импульс $\hbar\boldsymbol{q}$

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_n - \boldsymbol{k}_0.$$

Отметим, что соотношение (24) здесь не выполняется, вместо него справедливо следующее равенство:

$$q^2 = (k_0 - k_n)^2 + 4k_0k_n \sin^2 \frac{1}{2}\theta. \tag{132}$$

В дополнение к прямому процессу, когда налетающий электрон, теряя часть кинетической энергии, просто рассеивается, возможен и обмен налетающего электрона с одним из электронов атома. Обменный эффект может быть значителен в том случае, когда скорость рассеянного электрона равна по порядку величины скорости электронов атома, т. е. $k_n a \approx 1$. При тех условиях, когда применимо борновское приближение, этот эффект мал и им можно пренебречь. Мы будем рассматривать также налетающий электрон как частицу, отличную от электронов

атома. Используя формулу (123) для амплитуды перехода в борновском приближении, получаем

$$T_{0\to n} \approx \int e^{-iqr}\varphi_n^*(A)\, V(\boldsymbol{r},\ A)\,\varphi_0(A)\, d\boldsymbol{r}\, dA. \tag{133}$$

Это есть борновское приближение для амплитуды перехода частицы при переданном импульсе $\hbar\boldsymbol{q}$ в потенциале

$$V_n(\boldsymbol{r}) \equiv \int \varphi_n^*(A)\, V(\boldsymbol{r},\ A)\,\varphi_0(A)\, dA. \tag{134}$$

Результат справедлив при любом n, в частности, при упругом рассеянии ($n = 0$).

Чтобы преобразовать ответ к виду, аналогичному тому, который был получен в § 8, введем «электронную плотность»

$$\rho_n(\boldsymbol{r}) = Z\int \varphi_n^*(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{r}_2,\ \ldots,\ \boldsymbol{r}_Z)\,\varphi_0(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{r}_2,\ \ldots,\ \boldsymbol{r}_Z)\, d\boldsymbol{r}_2 \ldots d\boldsymbol{r}_Z \tag{135}$$

и соответствующий форм-фактор

$$F_n(\boldsymbol{q}) = \int e^{-iqr}\rho_n(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}.$$

В случае упругого рассеяния ($n = 0$) мы имеем просто электронную плотность основного состояния и соответствующий форм-фактор (см. ур. (48))

$$\rho_0(\boldsymbol{r}) = \rho(r), \qquad F_0(\boldsymbol{q}) = F(q).$$

Если подставить явное выражение для $V(\boldsymbol{r}, A)$ из уравнения (131) в определение $V_0(\boldsymbol{r})$, то мы увидим, что $V_0(\boldsymbol{r})$ представляет собой потенциал кулоновского взаимодействия электрона и заряда с распределением

$$e[Z\delta(\boldsymbol{r}) - \rho(r)].$$

Именно такой потенциал использовался в § 8. Таким образом, мы получили обоснование использованной там модели.

Рассмотрим теперь неупругое рассеяние ($n \neq 0$). Подставим явное выражение для $V(\boldsymbol{r}, A)$ в определение (131). Поскольку функции φ_0 и φ_n ортогональны, вклад от члена Ze^2/r исчезает. Другие члены дают потенциал взаимодействия электрона с плотностью заряда $-e\rho_n(\boldsymbol{r})$. Повторяя рассуждения § 8, находим

$$T_{0\to n} \approx -4\pi e^2 F_n(\boldsymbol{q}) \qquad (n \neq 0)$$

и, следовательно, в борновском приближении сечение неупругого рассеяния равно

$$\frac{d\sigma_{0\to n}}{d\Omega} = 4\,\frac{m^2e^4}{\hbar^4}\,\frac{k_n}{k_0}\,\frac{|F_n(\boldsymbol{q})|^2}{q^4}. \tag{136}$$

Отметим, что данная формула подобна формуле (49) для упругого рассеяния. Зависимость от углов определяется множителем $|F_n(\boldsymbol{q})|^2/q^4$. Свойства функции $F_n(\boldsymbol{q})$ легко вывести из свойств $\rho_n(\boldsymbol{r})$. Так, $F_n(0)=0$. Если a — радиус атома, то функция $F_n(\boldsymbol{q})$ в существенном отлична от нуля только в области $qa \lesssim 1$. В случае применимости борновского приближения ($\gamma \ll 1$) имеем $k_0 a \gg 1$, т. е. энергия столкновения значительно больше расстояния между атомными уровнями, которое имеет порядок $\hbar^2/ma^2$. Следовательно, $(k_0 - k_n)\,a$ имеет порядок $1/k_0 a$. Когда q меняется от $k_0 - k_n$ до $k_0 + k_n$, угол θ меняется от нуля до 2π, а qa меняется от $1/k_0 a$ до $2k_0 a$ (см. ур. (132)). Согласно приведенным рассуждениям наибольшую вероятность имеет рассеяние электрона в интервал углов, для которых $qa \lesssim 1$, т. е. в область малых углов

$$\theta \lesssim \frac{1}{k_0 a}.$$

В принципе неупругое рассеяние можно использовать для измерения координат электрона. Согласно предположению, поперечные размеры падающего волнового пакета значительно больше a и, следовательно, неопределенность величины поперечной компоненты импульса значительно меньше $\hbar/a$. Сразу после неупругого рассеяния, считая, что мы можем определить изменение квантового состояния атома, координаты электрона становятся известны с точностью порядка a. Однако направление импульса электрона становится известным лишь с точностью $1/k_0 a$, неопределенность в поперечной компоненте упомянутого импульса имеет порядок $\hbar/a$. Это полностью согласуется с тем, что было сказано в главе IV 1 тома об измерениях координат (см. в частности, обсуждение измерений с помощью камеры Вильсона, сноска [7]) на стр. 144. 1 тома).

§ 22. Кулоновское возбуждение ядер

Для иллюстрации обобщенного борновского приближения вернемся к задаче, которая уже рассматривалась в § XVII. 3, и при ее решении откажемся от использованного там классического приближения.

Если не оговорено противное, то используются обозначения § XVII. 3. Будем считать энергию столкновения достаточно малой, так что справедливо условие (XVII. 28). С другой стороны, условия (XVII. 29) и (XVII. 30), т. е. условия применимости классического приближения, могут не выполняться. Так как энергия столкновения меньше высоты кулоновского барьера Ze^2/R, протон «проникает» в ядро в процессе столкновения очень незначительно. Следовательно, эффекты, вызванные ядер-

ными взаимодействиями, малы и в данный момент мы их рассматривать не будем. Тогда столкновение описывается гамильтонианом $H^{(0)} + V$.

Пусть a и b — набор данных, которые описывают начальные и конечные условия столкновения, а $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ — соответствующие собственные функции оператора $H^{(0)}$. Поскольку в $H^{(0)}$ переменные, описывающие протон, и переменные ядра полностью разделены, функция $X_a^{(+)}$ есть произведение волновой функции ядра в состоянии α и кулоновской рассеянной волны $\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})$, описывающей стационарное состояние рассеяния протона с энергией E и импульсом $\hbar\boldsymbol{k}_a$ на потенциале Ze^2/r. Точно так же $X_b^{(-)}$ есть произведение волновой функции ядра в состоянии β и кулоновской волны $\xi_b^{(-)}(\boldsymbol{r})$ сходящегося типа [1]), которая описывает состояние рассеяния протона с энергией $(E - \Delta E)$ и импульсом $\hbar\boldsymbol{k}_b$ на потенциале Ze^2/r. Так как $X_a^{(+)}$ не дает вклада в канал β, точная формула (127) принимает вид

$$T_{a\to b} = \langle \Psi_b^{(-)} | V | X_a^{(+)} \rangle.$$

Если V рассматривать как малое возмущение, то его вкладом в $\Psi_b^{(-)}$ можно пренебречь и заменить $\Psi_b^{(-)}$ на $X_b^{(-)}$, получив, в согласии с обобщенным борновским приближением (129), следующий ответ:

$$T_{a\to b} = \langle X_b^{(-)} | V | X_a^{(+)} \rangle.$$

Поскольку при $r < R$ волны X практически равны нулю, мы можем заменить потенциал V его разложением (XVII. 34), что дает

$$\begin{aligned} T_{a\to b} &= \sum_{l,m} (-1)^m R_l^{-m} \langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M^\alpha \rangle, \\ R_l^m &= \frac{4\pi Ze}{2l+1} \int \xi_b^{(-)*}(\boldsymbol{r}) \frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}} \xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}. \end{aligned} \tag{137}$$

Воспользовавшись формулой (115), получаем сечение кулоновского возбуждения. Выражение для него аналогично выражению для сечения в полуклассической теории. Последнее получается из первого заменой R_l^m на $A(d\sigma_R/d\Omega)^{\frac{1}{2}} S_l^m$, где положительная константа A определяется соотношением: $A^2 = 4\pi^2\hbar^4 v_a/M^2 v_b$. Действительно, в пределе, когда выполнены условия (XVII. 29)—(XVII. 30), основной вклад в интеграл R_l^m

[1]) Ее разложение по сферическим функциям дает уравнение (77), в котором в качестве F_l берется регулярные кулоновские решения. Отметим, что $\xi_b^{(-)} = \xi_{Kb}^{(+)*}$.

дает окрестность классической траектории, и применение метода стационарной фазы приводит к полуклассическому ответу.

Обсуждение правил отбора, которое было проведено в конце § XVII. 3, может быть без изменений повторено и в данном случае. В частности, если в эксперименте ядра мишени не ориентированы и не измеряется поляризация возбужденных ядер, то имеем

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{1}{(2J_a+1)(2I_0+1)} \frac{M^2 v_b}{4\pi^2\hbar^4 v_a} |\langle \beta \| Q^{(l)} \| \alpha \rangle|^2 \left(\sum_m |R_{l_0}^m|^2 \right).$$

В приведенные выше рассуждения можно включить также и ядерные взаимодействия. Пусть V_{pA} — потенциал ядерного взаимодействия протона с нуклонами ядра A. Потенциал V_{pA} очень велик в области $r < R$ и практически равен нулю при $r > R$. Мы будем включать V_{pA} в оператор $H^{(0)}$. Удобно разбить потенциал V на внешнюю и внутреннюю части: $V = V_{\text{int}} + V_{\text{ext}}$ согласно определению

$$V_{\text{ext}} = \begin{cases} V, & \text{если } r > R, \\ 0, & \text{если } r < R, \end{cases}$$

и часть V_{int} также включить в $H^{(0)}$. После таких модификаций использованное выше разделение переменных уже не имеет места, а $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ не равны более чисто упруго рассеянным волнам. Согласно обобщенному борновскому приближению имеем

$$T_{a\to b} \approx T_{a\to b}^{(X)} + \langle X_b^{(-)} | V_{\text{ext}} | X_a^{(+)} \rangle.$$

Первое слагаемое $T_{a\to b}^{(X)}$ описывает ядерное возбуждение. Оно равно амплитуде перехода, которая получается при замене взаимодействия протона с ядром во внешней области ($r > R$) чисто кулоновским взаимодействием. При этом возбуждение $\alpha \to \beta$ возможно, только если протон проникает в ядро. Второе слагаемое описывает собственно кулоновское возбуждение.

Из-за существования кулоновского барьера и характера ядерных сил (короткодействующие и большие) волны $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ при низких энергиях имеют узкие резонансы, подобные тем, которые исследовались в главе X (раздел IV). Зная характеризующие эти резонансы параметры — энергию, ширину резонанса в различных открытых каналах — можно построить волны $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ во внешней области[1]) и вычислить два члена амплитуды рассеяния. Вне резонансов протон практически не проникает в ядро, амплитуда $T_{a\to b}^{(X)}$ пренебрежимо мала, и ам-

[1]) Детальное рассмотрение этого вопроса содержится в работе, упомянутой в первой сноске к § 16.

плитуда кулоновского возбуждения с очень хорошей точностью дается формулой (137), в которой волны X равны чисто кулоновским рассеянным волнам. При переходе через резонанс вкладом амплитуды $T^{(X)}_{a\to b}$ нельзя пренебречь, а ее зависимость от энергии имеет типично резонансный вид (см. ур. (64)). В то же время амплитуда кулоновского возбуждения также несколько модифицируется, на чем мы здесь не останавливаемся, и обе амплитуды дают когерентный вклад в полное сечение.

§ 23. Функции Грина и интегральные уравнения для стационарных решений рассеяния

Построение § 13 можно легко распространить на случай столкновений сложных систем. С каждым из гамильтонианов H, H_α и т. д. можно связать соответствующую функцию Грина $[E-H\pm i\varepsilon]^{-1}$, $[E-H_\alpha\pm i\varepsilon]^{-1}$ и т. д. За исключением нескольких изменений в обозначениях, результаты § 13 остаются справедливыми и в данном случае. Они могут быть получены аналогичным образом, в частности, свойства (85), тождества (88), (89), асимптотические выражения для этих функций. Например, для каждого открытого канала γ имеем (см. ур. (94))

$$\left\langle \boldsymbol{r}_\gamma \left| \frac{1}{E-H\pm i\varepsilon} \right| u\right\rangle \underset{r_\gamma\to\infty}{\sim} -\frac{M_\gamma}{2\pi\hbar^2}\,\varphi_\gamma \frac{e^{\pm ik_c r_\gamma}}{r_\gamma}\left\langle \Psi^{(\mp)}_{(\gamma,\pm k_c)}\middle| u\right\rangle,$$

$$(\boldsymbol{k}_c = k_c \boldsymbol{r}_\gamma/r_\gamma).$$

Используя упомянутые свойства функций Грина, можно вывести интегральные уравнения

$$\Psi^{(\pm)}_a = \Phi_a + \frac{1}{E-H_\alpha\pm i\varepsilon}\,V_\alpha\Psi^{(\pm)}_a, \tag{138}$$

$$\Psi^{(\pm)}_a = X^{(\pm)}_a + \frac{1}{E-H_\alpha-U_\alpha\pm i\varepsilon}\,W_\alpha\Psi^{(\pm)}_a, \tag{139}$$

и т. д., а также формулы

$$\Psi^{(\pm)}_a = \left(1+\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}\,V_\alpha\right)\Phi_a = \tag{140}$$

$$= \left(1+\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}\,W_\alpha\right)X^{(\pm)}_a. \tag{141}$$

Из приведенных интегральных уравнений легко получить борновское разложение для амплитуд переходов. Подставляя в формулу (121) выражение (140) и раскладывая функцию

Грина, получаем

$$\langle b\,|\,T\,|\,a\rangle = \langle \Phi_b\,|\left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E-H+i\varepsilon}\,V_\alpha\right)|\,\Phi_a\rangle = \tag{142}$$

$$= \langle \Phi_b\,|\left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E-H_\alpha+i\varepsilon}\,V_\alpha + \ldots\right)|\,\Phi_a\rangle. \tag{143}$$

В тех частных случаях, которые рассматривались в разделах I и II, амплитуды переходов можно было представить в виде матричных элементов некоторого оператора T, определяемого формулой (101) или одним из интегральных уравнений (102). В случае сложных столкновений нельзя определить один такой оператор. Тем не менее, используя уравнение (142), мы покажем, что любую амплитуду перехода из канала α в канал β при энергии E можно рассматривать как матричный элемент некоторого оператора $T^{\beta\alpha}$, определяемого формулой

$$T^{\beta\alpha} = V_\beta + V_\beta \frac{1}{E-H+i\varepsilon}\,V_\alpha. \tag{144}$$

Отметим, что для столкновений с перераспределением ($V_\beta \neq V_\alpha$) эти матричные элементы не согласуются с обычным определением матричного представления операторов, поскольку векторы $|\Phi_a\rangle$ и $\langle\Phi_b|$, встречающиеся в формуле

$$T_{a\to b} = \langle \Phi_b\,|\,T^{\beta\alpha}\,|\,\Phi_a\rangle, \tag{145}$$

не ортогональны.

§ 24. Рассеяние частицы на двух центрах

Основное достоинство формальных построений предыдущего параграфа состоит в том, что они годятся для любых сложных столкновений. Для того чтобы ближе познакомиться с этим формализмом, рассмотрим несложную задачу о рассеянии частицы на двух рассеивающих центрах и получим ряд известных результатов.

Пусть, например, электрон сталкивается с двумя атомами. В дальнейшем мы не будем учитывать обменных эффектов и не станем делать каких-либо предположений о длине волны налетающей частицы.

Ядра атомов будем считать бесконечно тяжелыми, рассматривая их как фиксированные центры. Ядро 1 выберем в качестве начала координат и обозначим $\boldsymbol{R}$ вектор, соединяющий ядра 1 и 2 (см. рис. 18). Предполагается, что расстояние R велико по сравнению с атомными размерами $a \ll R$. Столкнове-

ние описывается гамильтонианом

$$H = H_0 + V, \tag{146}$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + h_1 + h_2, \tag{146'}$$

$$V = V_1 + V_2, \tag{146''}$$

где h_1 и h_2 — операторы энергии атомов 1 и 2, а V_1 и V_2 — потенциалы взаимодействия атомов с налетающей частицей. Обозначим свободную функцию Грина G_0

$$G_0 \equiv (E - H_0 + i\varepsilon)^{-1}.$$

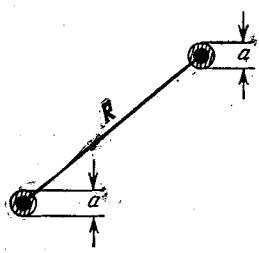


Рис. 18.

Матрицу перехода T, связанную с рассеянием частицы (упругим или неупругим) на двух атомах, можно представить в виде борновского разложения

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \ldots. \tag{147}$$

Заменяя V на $V_1 + V_2$, получаем разложение T по степеням V_1 и V_2

$$T = V_1 + V_2 + V_1G_0V_1 + V_1G_0V_2 + V_2G_0V_1 + V_2G_0V_2 + \\ + V_1G_0V_1G_0V_1 + V_1G_0V_1G_0V_2 + \ldots.$$

Мы не будем делать каких-либо предположений о величине потенциалов V_1 и V_2. По этой причине приведенное разложение не обязано быстро сходиться, и в том виде, как оно записано, его нельзя использовать в качестве отправной точки какого-либо приближенного метода. Однако можно так перегруппировать члены этого разложения, что в результате получится быстро сходящееся разложение.

Такая возможность основана на следующем замечании. Рассмотрим матричный элемент члена второго порядка $V_1G_0V_2$ в представлении, где диагонален оператор $\boldsymbol{r}$. Матричный элемент свободной функции Грина G_0 содержит множитель $e^{ik|r-r'|}/|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$. Поскольку потенциал V_1 сосредоточен в малой окрестности начала координат, а V_2 — в малой окрестности точки $\boldsymbol{R}$, то упомянутый множитель имеет порядок $1/R$. То же справедливо и для члена $V_2G_0V_1$. Грубо говоря, слагаемые $V_1G_0V_2$ и $V_2G_0V_1$ в a/R раз меньше слагаемых $V_1G_0V_1$ и $V_2G_0V_2$. Это же замечание относится и к остальным слагаемым. Оно позволяет нам классифицировать различные члены в соответствии с тем, сколько раз G_0 стоит между V_1 и V_2. Мы будем называть членами первого порядка такие, в которых G_0 ни разу не появляется между V_1 и V_2, членами второго порядка, — если

G_0 появляется между V_1 и V_2 один раз, ..., членами n-го порядка, — если G_0 появляется $(n-1)$ раз, и т. д. Согласно этой терминологии $V_1G_0V_1$ и $V_2G_0V_2$ — члены первого порядка а $V_1G_0V_2$, $V_2G_0V_1$ — второго порядка.

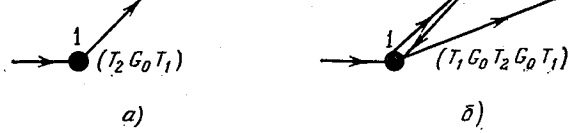
Введем индивидуальные матрицы перехода T_1 и T_2

$$T_i = V_i + V_iG_0T_i = V_i + V_iG_0V_i + V_iG_0V_iG_0V_i + \ldots \quad (148)$$
$$(i = 1, 2).$$

Матрица перехода T_1 отвечает рассеянию на атоме 1 в предположении, что налетающая частица не взаимодействует со вторым атомом. Аналогичный смысл имеет матрица перехода T_2. Используя операторы T_1, T_2 и G_0, просто записать вклады различных порядков. Искомые выражения определяются путем несложного исследования структуры ряда. Первый порядок дает $T_1 + T_2$, второй порядок $T_1G_0T_2 + T_2G_0T_1$ и т. д. В результате получаем

$$T = (T_1 + T_2) + (T_1G_0T_2 + T_2G_0T_1) + (T_1G_0T_2G_0T_1 + T_2G_0T_1G_0T_2) + \ldots. \quad (149)$$

Разложение (149) является исходной точкой нашего подхода к данной задаче. Легко дать интерпретацию различным членам этого разложения. Члены первого порядка отвечают рассеянию частицы либо на атоме 1 (T_1), либо на атоме 2 (T_2).



а) *б)*

Рис. 19. Графическое изображение членов разложения (149).

Члены второго порядка отвечают двойному рассеянию; так, член $T_1G_0T_2$ описывает рассеяние налетающей частицы на атоме 2 (оператор T_2), последующее распространение рассеянной частицы от атома 2 к атому 1 (оператор G_0) и, наконец, рассеяние на атоме 1 (оператор T_1). Точно так же каждый член порядка n описывает n последовательных процессов рассеяния на атомах 1 и 2.

В связи с такой интерпретацией каждый член можно схематически представить диаграммой того же типа, что и в нестационарной теории возмущений (рис. 10). На рис. 19 изображены две такие диаграммы.

Разложение (149) связывает амплитуды переходов при рассеянии на двух центрах с амплитудами переходов при рассеянии на отдельных центрах.

Предположим, для простоты, что атомы тождественны друг другу, и обозначим $t(e)$ матрицу перехода с энергией e при рассеянии на одном центре, т. е. при рассеянии частицы на одном атоме, расположенном в начале координат.

Пусть $|\boldsymbol{k}mn\rangle$ есть собственный вектор H_0, который равен произведению волновой функции φ_m атома 1, волновой функции φ_n атома 2 и плоской волны $e^{i\boldsymbol{kr}}$, описывающей налетающую частицу с импульсом $\hbar\boldsymbol{k}$,

$$H_0|\boldsymbol{k}mn\rangle = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + e_m + e_n\right)|\boldsymbol{k}mn\rangle.$$

Мы пользуемся нормировкой, при которой

$$\langle \boldsymbol{k}'m'n'|\boldsymbol{k}mn\rangle = (2\pi)^3\,\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\delta_{mm'}\delta_{nn'}.$$

Точно так же вектор $|\boldsymbol{k}m\rangle$ равен произведению плоской волны $e^{i\boldsymbol{kr}}$ на волновую функцию φ_m атома из задачи с одним рассеивающим центром.

Из определения T_1 (148) легко получить, что

$$\langle \boldsymbol{k}'m'n'|T_1(E)|\boldsymbol{k}mn\rangle = \delta_{nn'}\langle \boldsymbol{k}'m'|t(E-e_n)|\boldsymbol{k}m\rangle. \qquad (150)$$

Аналогичным образом можно найти связь матричных элементов T_2 с элементами матрицы перехода при рассеянии на одном атоме, расположенном в точке $\boldsymbol{R}$. Такая матрица перехода получается из $t(e)$ общим сдвигом на $\boldsymbol{R}$ и, следовательно (задача 5),

$$\langle \boldsymbol{k}'m'n'|T_2(E)|\boldsymbol{k}mn\rangle = \delta_{mm'}e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\boldsymbol{R}}\langle \boldsymbol{k}'n'|t(E-e_m)|\boldsymbol{k}n\rangle. \qquad (151)$$

Формулы (150) и (151) справедливы для любых переходов, в частности, и в том случае, когда энергии состояний $|\boldsymbol{k}mn\rangle$ и $|\boldsymbol{k}'m'n'\rangle$ отличны от E.

§ 25. Простое рассеяние. Интерференция

В качестве первого приложения разложения (149) вычислим сечение упругого рассеяния частицы на двух атомах.

Допустим, что атомы находятся до и после рассеяния в основном состоянии φ_0. Пусть $\boldsymbol{k}_0$ и $\boldsymbol{k}$ — волновые векторы падающей и рассеянной волн. Таким образом, мы рассматриваем переход $(\boldsymbol{k}_0 00) \to (\boldsymbol{k}00)$ и имеем

$$k = k_0, \quad E = \hbar^2k^2/2m + 2e_0.$$

Чтобы вычислить амплитуду перехода, сохраним в разложении (149) только члены первого порядка

$$T \approx T_1 + T_2. \qquad (152)$$

Принимая во внимание соотношения (150) и (151) и вводя обозначения

$$\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0,$$

$$\langle \boldsymbol{k}0 \,|\, t\,(E - e_0) \,|\, \boldsymbol{k}_0 0\rangle \equiv \langle \boldsymbol{k} \,|\, t \,|\, \boldsymbol{k}_0\rangle,$$

находим

$$\langle \boldsymbol{k}00 \,|\, T \,|\, \boldsymbol{k}_0 00\rangle \approx [1 + \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}}]\, \langle \boldsymbol{k} \,|\, t \,|\, \boldsymbol{k}_0\rangle. \tag{153}$$

Мы увидим, что это соотношение дает амплитуду рассеяния в рамках элементарной теории интерференции. Соотношение (153) позволяет связать сечение упругого рассеяния на двух атомах $d\Sigma/d\Omega$ с сечением $d\sigma/d\Omega$ такого же упругого рассеяния на одном атоме, т. е. с сечением процесса $(\boldsymbol{k}_0 0) \to (\boldsymbol{k}0)$. Первое равно квадрату модуля элемента $\langle \boldsymbol{k}00 \,|\, T \,|\, \boldsymbol{k}_0 00\rangle$, умноженному на соответствующий множитель, а второе сечение равно квадрату модуля $\langle \boldsymbol{k} \,|\, t \,|\, \boldsymbol{k}_0\rangle$, умноженному на тот же множитель. Из соотношения (153) следует

$$d\Sigma/d\Omega \approx 2I\,(\Omega)\, d\sigma/d\Omega, \tag{154}$$

$$I\,(\Omega) = 1 + \cos\,(\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}). \tag{155}$$

Наличие в формуле (154) множителя $I(\Omega)$ связано с явлением интерференции волн, рассеянных каждым атомом. Не будь интерференции мы имели бы равенство $I(\Omega) = 1$ и сечение $d\Sigma/d\Omega$ было бы просто суммой сечений рассеяния на каждом из атомов 1 и 2.

Мы получим обычные результаты, характерные для интерференции, если исследуем поведение $I(\Omega)$ как функции угла рассеяния. Ограничимся обсуждением только двух предельных случаев, когда длина волны $\lambda = 2\pi/k$ много больше или много меньше R.

Если $\lambda \gg R$, то $\boldsymbol{q}\boldsymbol{R} \ll 1$ независимо от угла рассеяния и $I(\Omega) = 2$. Следовательно, сечение рассеяния на двух атомах в четыре раза больше индивидуального сечения или в два раза больше того ответа, который мы получили бы, если бы не было явления интерференции.

В случае $\lambda \ll R$ функция $I(\Omega)$ при изменении угла рассеяния быстро колеблется между значениями 0 и 2. Пусть углы, образованные векторами $\boldsymbol{k}_0$ и $\boldsymbol{k}$ с вектором $\boldsymbol{R}$, равны α_0 и α соответственно. Тогда

$$\boldsymbol{q}\boldsymbol{R} = \frac{2\pi R\,(\cos\alpha_0 - \cos\alpha)}{\lambda}.$$

Следовательно, $I(\Omega)$ обращается в нуль всякий раз, когда $(\cos\alpha - \cos\alpha_0)$ равно произведению λ/R на полуцелое число,

и равно 2 всякий раз, когда $(\cos\alpha - \cos\alpha_0)$ кратно λ/R. Соответствующие значения α определяют направления минимумов и максимумов интерференции. Ширина интерференционных полос имеет порядок λ/R. Возможность наблюдения этих эффектов зависит от угловой разрешающей способности детектирующей аппаратуры. Последняя регистрирует частицы, рассеянные в некоторый телесный угол с *конечными* размерами $\delta\Omega \equiv (\delta\alpha)^2$. Полное число регистрируемых частиц равно интегралу от $d\Sigma/d\Omega$ по этой конечной области. Зависимость от углов $d\Sigma/d\Omega$ в этой области в основном определяется множителем $I(\Omega)$. Если $\delta\alpha \gg \lambda/R$, то функция $I(\Omega)$ сильно осциллирует в области интегрирования и ее можно заменить средним значением, не меняя результата, т. е. $I(\Omega) = 1$, и ответ получается такой, как если бы рассеяние на двух атомах было некогерентным [1]). Если же $\delta\alpha \ll \lambda/R$, то $I(\Omega)$ практически не меняется в области интегрирования и разрешающая способность детектора достаточна для наблюдения явления интерференции.

Рассмотрим теперь неупругое столкновение, при котором один из атомов переходит из основного состояния в возбужденное. Пусть $\boldsymbol{k}_n$ — волновой вектор рассеянной волны, тогда

$$E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} + e_0 + e_n.$$

Сечение $d\Sigma_n/d\Omega$ есть сумма сечений $d\Sigma_{n0}/d\Omega$ и $d\Sigma_{0n}/d\Omega$, которые соответствуют переходам $(\boldsymbol{k}_0 00) \to (\boldsymbol{k}_n n0)$ и $(\boldsymbol{k}_0 00) \to (\boldsymbol{k}_n 0n)$. В приближении (152), когда мы сохраняем в разложении для T только члены, отвечающие простому рассеянию, эти сечения легко вычисляются. При переходе $(\boldsymbol{k}_0 00) \to (\boldsymbol{k}_n n0)$ атом 1 возбуждается, а атом 2 остается в основном состоянии. Вклад от T_2 очевидно обращается в нуль (см. ур. (151)), а вклад от T_1 дает $d\sigma_n/d\Omega$ — сечение процесса $(\boldsymbol{k}_0 0) \to (\boldsymbol{k}_n n)$ — неупругого рассеяния частицы на одном атоме. Переход $(\boldsymbol{k}_0 00) \to (\boldsymbol{k}_n 0n)$ отвечает противоположной ситуации: обращается в нуль вклад от T_1, а вклад от T_2 равен $d\sigma_n/d\Omega$. Окончательно,

$$\frac{d\Sigma_n}{d\Omega} \equiv \frac{d\Sigma_{n0}}{d\Omega} + \frac{d\Sigma_{0n}}{d\Omega} = 2\frac{d\sigma_n}{d\Omega}.$$

В отличие от упругого рассеяния каждый атом действует так, как если бы он был один в этом процессе: волны, неупруго рассеянные атомом 1 и атомом 2, отвечают различным каналам и не могут интерферировать.

---

[1]) Этот результат подтверждает и уточняет те условия из § X. 2, при выполнении которых можно считать, что мишень состоит из независимых центров рассеяния.

§ 26. Многократное рассеяние

Рассмотрим процесс $(k_0 00) \to (kpq)$, при котором атомы 1 и 2 переходят из основного состояния в возбужденные состояния p и q

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + e_p + e_q.$$

Обозначим сечение этого процесса $d\Sigma_{pq}/d\Omega$.

Поскольку при переходе меняются квантовые состояния обоих атомов, вклад от членов простого рассеяния T_1 и T_2 обращается в нуль и нам следует воспользоваться разложением для T вплоть до второго порядка. Это дает

$$\langle kpq \,|T|\, k_0 00\rangle \approx A_{12} + A_{21}, \tag{156}$$

где

$$A_{ij} \equiv \langle kpq|\, T_i G_0 T_j \,|\, k_0 00\rangle. \tag{157}$$

На рис. 20 изображены диаграммы для этих амплитуд двукратного рассеяния.

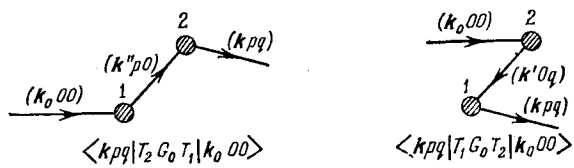


Рис. 20. Диаграммы амплитуд двойного рассеяния.

Вычислим вначале A_{21}. Чтобы воспользоваться условием $a \ll R$, вычисления будем проводить в представлении $\{rmn\}$. Используя коммутативность операторов G_0, h_1 и h_2, находим

$$A_{21} = \iint f_2(\boldsymbol{r}'')\, g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')\, f_1(\boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}''\, d\boldsymbol{r}', \tag{158}$$

где

$$f_1(\boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r}' p0 \,|\, T_1 \,|\, \boldsymbol{k}_0 00\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}'} \langle \boldsymbol{k}' p0 \,|\, T_1 \,|\, \boldsymbol{k}_0 00\rangle\, d\boldsymbol{k}', \tag{159}$$

$$f_2(\boldsymbol{r}'') \equiv \langle \boldsymbol{k}pq \,|\, T_2 \,|\, \boldsymbol{r}'' p0\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\boldsymbol{k}''\boldsymbol{r}''} \langle \boldsymbol{k}pq \,|\, T_2 \,|\, \boldsymbol{k}'' p0\rangle\, d\boldsymbol{k}'', \tag{160}$$

$$g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r}'' p0 \,|\, G_0 \,|\, \boldsymbol{r}' p0\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iK_p|\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}'|}. \tag{161}$$

В последнем выражении положительная величина K_p определяется из уравнения

$$E = \frac{\hbar^2 K_p^2}{2m} + e_p + e_0.$$

Мы будем использовать также вектор $\boldsymbol{K}_p$

$$\boldsymbol{K}_p \equiv K_p \boldsymbol{R}/R.$$

В силу свойств оператора T_1 функция $f_1(\boldsymbol{r}')$ в существенном отлична от нуля только в области с линейными размерами порядка a и центром в начале координат. Аналогичным образом функция $f_2(\boldsymbol{r}'')$ в существенном отлична от нуля в такой же области, но с центром в точке $\boldsymbol{R}$. Следовательно, в интеграле (158) мы можем заменить $g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')$ первым членом его разложения по степеням $\boldsymbol{r}'/R$ и $(\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{R})/R$. Возникающая при этом ошибка в вычислении A_{21} имеет порядок a/R. Поскольку

$$|\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{r}'| \approx R + \boldsymbol{R}(\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{R} - \boldsymbol{r}')/R + \ldots,$$

имеем

$$g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iK_p(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}')}}{R}. \qquad (162)$$

Подставляя выражения (159), (160) и (162) в правую часть (158) и выполняя интегрирования, находим

$$A_{21} \approx -(m/2\pi\hbar^2 R) \langle \boldsymbol{k}pq | T_2 | \boldsymbol{K}_p p0 \rangle \langle \boldsymbol{K}_p p0 | T_1 | \boldsymbol{k}_0 00 \rangle. \qquad (163)$$

Точно так же, определяя вектор $\boldsymbol{K}_q$ следующим образом:

$$\boldsymbol{K}_q \equiv -K_q \boldsymbol{R}/R, \qquad E = \frac{\hbar^2 K_q^2}{2m} + e_0 + e_q,$$

получаем для A_{12} выражение (с ошибкой порядка a/R)

$$A_{12} \approx -(m/2\pi\hbar^2 R) \langle \boldsymbol{k}pq | T_1 | \boldsymbol{K}_q 0q \rangle \langle \boldsymbol{K}_q 0q | T_2 | \boldsymbol{k}_0 00 \rangle. \qquad (164)$$

Отметим, что стоящие в выражениях (163) и (164) матричные элементы T_1 и T_2 соответствуют переходам, сохраняющим энергию. Воспользовавшись соотношениями (150) и (151), мы можем выразить A_{21} и A_{12} в терминах амплитуд перехода при неупругом рассеянии на одном атоме. То же верно и для сечения процесса $d\Sigma_{pq}/d\Omega$, поскольку

$$\frac{d\Sigma_{pq}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v_0} |A_{21} + A_{12}|^2 \rho(E) =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar v_0} |A_{21}|^2 \rho(E) + \frac{2\pi}{\hbar v_0} |A_{12}|^2 \rho(E) + \frac{2\pi}{\hbar v_0} (A_{21}^* A_{12} + A_{21} A_{12}^*) \rho(E). \qquad (165)$$

Произведя соответствующие вычисления, приходим к следующему результату:

$$d\Sigma_{pq}/d\Omega = (d\sigma_p(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{K}_p)/R^2 d\Omega)(d\sigma_q(\boldsymbol{K}_p \to \boldsymbol{k})/d\Omega) +$$
$$+ (d\sigma_q(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{K}_p)/R^2 d\Omega)(d\sigma_p(\boldsymbol{K}_q \to \boldsymbol{k})/d\Omega) +$$
$$+ \text{интерференционные члены}. \qquad (166)$$

Вычисление интерференционных членов мы предоставляем читателю. Символ $d\sigma_n(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')/d\Omega$ в этом выражении обозначает сечение неупругого рассеяния частицы на атоме $(\boldsymbol{k}0)\to(\boldsymbol{k}'n)$.

Два первых члена в формуле (166) в точности совпадают с теми, которые получаются при элементарном классическом рассмотрении. Рассуждая классически, двукратное рассеяние можно представлять себе двумя способами: либо частица вначале неупруго рассеивается на атоме 1 в направлении атома 2, а затем неупруго рассеивается на атоме 2 в конечном направлении, либо вначале рассеивается на атоме 2 в направлении атома 1, а затем — на атоме 1. Сечения этих двух процессов участвуют в качестве первого и второго слагаемых в выражении (166). К ним следует добавить члены, отвечающие интерференции двух типов рассеянных волн. Относительно этих членов можно сделать те же замечания, что и в § 25. Их наблюдение возможно, если разрешающая способность детектора достаточна для различия углов, разность которых имеет порядок λ/R.

Если $\lambda \ll a$, то амплитуды рассеяния при отклонениях, превышающих λ/a, практически равны нулю и существенны только сечения рассеяния вперед. Следовательно, как легко видеть из уравнений (163)—(165), двукратное рассеяние возможно только в том случае, когда прямая, на которой расположены атомы, с точностью до λ/a совпадает с направлением движения налетающей частицы, т. е. когда $\boldsymbol{k}_0\|\boldsymbol{R}$ или $\boldsymbol{k}_0\|(-\boldsymbol{R})$. В первом случае величина A_{12} пренебрежимо мала, а величина A_{21} отлична от нуля при малых отклонениях, т. е. при $\boldsymbol{k}\|\boldsymbol{k}_0$ с точностью до λ/a частица вначале рассеивается на атоме 1, а затем — на атоме 2 в направлении, почти совпадающим с первоначальным. Во втором случае порядок столкновений противоположный. На этих результатах основано наблюдение «траектории» ионизованных частиц в камере Вильсона (см. сноску [7]) на стр. 144 тома 1).

Раздел IV. ВЫЧИСЛЕНИЕ АМПЛИТУД ПЕРЕХОДА ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

§ 27. Стационарные выражения сдвигов фаз. Обсуждение

Вариационный метод уже использовался для определения уровней энергии (гл. XVIII). В настоящем разделе мы кратко рассмотрим его применение для вычисления сдвигов фаз и, в более общем случае, амплитуд перехода. Для этого надлежит выразить амплитуды как функционалы от волновых функций задачи рассеяния, которые стационарны по отношению к вариа-

циям функций в окрестности их точного значения. Интегральные выражения для амплитуд перехода, полученные в предыдущем разделе, для этой цели не годятся, поскольку они не стационарны. Например, выражение (54) для T_l, рассматриваемое как функционал от ψ_l, не является стационарным, когда ψ_l — точное решение радиального уравнения; аналогично выражение (127) для $T_{a\to b}$, рассматриваемое как функционал от $\Psi_b^{(-)}$, не является стационарным, когда $\Psi_b^{(-)}$ меняется в окрестности своего точного значения. Было предложено несколько стационарных выражений для амплитуд перехода. Мы приведем здесь выражение, полученное Швингером [1]), которое оказалось наиболее удобным.

В этом параграфе мы рассмотрим случай частицы в центральном потенциале и получим стационарное выражение для коэффициента T_l разложения амплитуды перехода по сферическим функциям (разложение (51)). За исключением нескольких изменений, отмеченных ниже, мы следуем обозначениям § 9.

Если $\psi_a^{(+)}$ — полная стационарная рассеянная волна, то парциальная волна ψ_l удовлетворяет интегральному уравнению (56). Имея в виду дальнейшее обобщение, перепишем последнее в виде

$$\psi_l(r) = j_l(kr) + g_l^{(+)} V \psi_l, \tag{167}$$

где $g_l^{(+)}$ — интегральный оператор, ядром которого является функция Грина

$$g_l^{(+)}(r, r') \equiv -(2mk/\hbar^2)\, j_l(kr_<)\, h_l^{(+)}(kr_>); \tag{168}$$

другими словами

$$g_l^{(+)} V \psi_l \equiv \int_0^\infty g_l^{(+)}(r, r')\, V(r')\, \psi_l(r')\, r'^2\, dr'.$$

Будем также использовать обозначение $\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle$ для скалярного произведения двух радиальных функций φ_1, φ_2

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle \equiv \int_0^\infty \varphi_1^*(r)\, \varphi_2(r)\, r^2\, dr.$$

Тогда интегральную форму (54) для T_l можно переписать в виде

$$T_l = \langle j_l, V\psi_l \rangle. \tag{169}$$

---

[1]) См. цитированную в начале этой главы работу Липпмана и Швингера. Обсуждение относительных преимуществ различных выражений, предложенных для вариационного вычисления сдвигов фаз, имеется в статье *M. Moe, D. S. Saxon.* Phys. Rev. **111**, 950 (1958).

Введем обозначения

$$A[\psi] \equiv \langle j_l,\ V\psi\rangle = \langle \psi^*,\ Vj_l\rangle = \int_0^\infty j_l(kr)\,V(r)\,\psi(r)\,r^2\,dr, \tag{170}$$

$$B[\psi] \equiv \langle \psi^*,\ (V - Vg_l^{(+)}V)\,\psi\rangle = \int_0^\infty \psi^2(r)\,V(r)\,r^2\,dr - $$

$$- \int_0^\infty\int_0^\infty (\psi(r)\,V(r)\,g_l^{(+)}(r,\ r')\,V(r')\,\psi(r'))\,r^2\,dr\,r'^2\,dr' \tag{171}$$

и рассмотрим функционал

$$\mathcal{T}_l[\psi] \equiv \frac{A^2}{B}, \tag{172}$$

зависящий от функции ψ. Область изменения ψ ограничена только условием локальной интегрируемости функции $r^2|\psi|^2$.

Как очевидное следствие соотношений (167) и (169) имеем

$$\mathcal{T}_l[\psi_l] = T_l.$$

Отметим также, что функционал $\mathcal{T}_l$ *не зависит ни от нормировки функции* ψ (он не меняется при умножении ψ на произвольную постоянную), *ни от значений, которые принимает* ψ *в области, где* $V(r) = 0$. Следовательно, $\mathcal{T}_l$ принимает то же самое значение T_l для любых функций ψ_l, которые удовлетворяют менее жесткому условию, чем уравнение (167).

$$\psi_l(r) = Cj_l(kr) + g_l^{(+)}V\psi_l, \quad \text{если} \quad V(r) \neq 0 \tag{167a}$$

(C — произвольная постоянная).

Вычислим вариацию $\delta\mathcal{T}_l$ как функцию от $\delta\psi$. Согласно определению (172)

$$\delta\mathcal{T}_l = \frac{2A}{B}\,\delta A - \frac{A^2}{B^2}\,\delta B.$$

Вариация δA равна

$$\delta A = \int_0^\infty \delta\psi\,V(r)\,j_l(kr)\,r^2\,dr = \langle \delta\psi^*,\ Vj_l\rangle,$$

и принимая во внимание, что V вещественно, а $g_l^{(+)}(r,\ r')$ симметрично по r и r', для вариации δB получаем

$$\delta B = 2\langle \delta\psi^*, (V - Vg_l^{(+)}V)\,\psi\rangle.$$

Следовательно, мы можем записать

$$\delta\mathscr{T}_l = \frac{2A}{B^2}\langle \delta\psi^*, F\rangle,$$

где

$$F(r) = B[\psi]\, V(r)\, j_l(kr) - A[\psi]\, V(r)\left(\psi - g_l^{(+)}V\psi\right).$$

Для того чтобы $\delta\mathscr{T}_l = 0$ при любых $\delta\psi$, необходимо и достаточно, чтобы $F(r) = 0$. Для этого необходимо, чтобы $j_l(kr)$ и $\psi - g_l^{(+)}V\psi$ были пропорциональны друг другу в области, где $V(r)$ отлично от нуля, т. е. чтобы ψ была одной из функций, удовлетворяющих уравнению (167а). Легко показать, что это является также и достаточным условием. Итак, *стационарное значение $\mathscr{T}_l$ равно искомой амплитуде*

$$T_l = \mathscr{T}_l\big|_{\text{st}}. \tag{173}$$

Чтобы в вычислениях участвовали только вещественные функции, мы выделили вещественную и мнимую части $g_l^{(+)}(r, r')$. Вещественная часть будет функцией Грина

$$g_l^{(1)}(r, r') \equiv -(2mk/\hbar^2)\, j_l(kr_<)\, n_l(kr_>),$$

и мы получим

$$g_l^{(+)}(r, r') = g_l^{(1)}(r, r') - i(2mk/\hbar^2)\, j_l(kr)\, j_l(kr').$$

Подставляя это выражение в определение $\mathscr{T}_l$ (т. е. в выражение (171) для $B[\psi]$), мы можем переписать (171) в эквивалентной форме

$$T_l^{-1} = \mathscr{T}_l^{-1}\Big|_{\text{st}} = \frac{\left\langle \psi^*, \left(V - Vg_l^{(1)}V\right)\psi\right\rangle}{\langle j_l, V\psi\rangle^2}\Bigg|_{\text{st}} + i\,\frac{2mk}{\hbar^2}$$

и так как из уравнения (52) имеем

$$T_l^{-1} - i(2mk/\hbar^2) = -2mk\operatorname{ctg}\delta_l/\hbar^2,$$

то получаем следующее стационарное выражение для $k\operatorname{ctg}\delta_l$:

$$k\operatorname{ctg}\delta_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\left\langle \psi^*, \left(V - Vg_l^{(1)}V\right)\psi\right\rangle}{\langle j_l, V\varphi\rangle^2}\Bigg|_{\text{st}} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\int_0^\infty \psi^2 Vr^2\, dr - \int_0^\infty\int_0^\infty \left(\psi(r)\, V(r)\, g_l^{(1)}(r, r')\, V(r')\, \psi(r')\right) r^2\, drr'^2\, dr'}{\left[\int_0^\infty j_l(kr)\, V(r)\, \psi(r)\, r^2\, dr\right]^2}\Bigg|_{\text{st}}. \tag{174}$$

Можно показать, что функцию ψ_l, для которой правая часть уравнения (174) стационарна, можно брать вещественной и что это условие вещественности пробных функций не меняет полученного вариационного свойства.

§ 28. Вариационные вычисления сдвига фаз. Обсуждение

Отправной точкой при вычислении сдвигов фаз вариационным методом служит уравнение (174). Для вычисления функционала в правой части подставляют вместо ψ пробную функцию φ, зависящую от нескольких параметров, и определяют значение получившейся функции, стационарное по отношению к вариации этих параметров. Чем ближе будет пробная функция φ к точному решению ψ, тем ближе будет приближенное значение $k \operatorname{ctg} \delta_l$ к точному значению. Как уже указывалось, и в этом заключается основное достоинство вариационного метода Швингера, результат не зависит от нормировки φ и от значений, которые принимает эта функция в областях, где потенциал V обращается в нуль. Следовательно, для того чтобы этим методом получить близкий к точному ответ, достаточно взять такую пробную функцию, общий вид которой совпадает с формой точного решения в области действия потенциала. Оценка погрешности основана на этих полуколичественных рассмотрениях и является, как и при вариационном вычислении энергетических уровней, в значительной степени эмпирической.

Если мы ограничимся подстановкой в правую часть (174) свободной волны $j_l(kr)$ вместо ψ, то получим

$$k \operatorname{ctg} \delta_l \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1-\Delta_l}{\langle j_l, V j_l \rangle}, \tag{175}$$

где

$$\Delta_l \equiv \frac{\langle j_l, V g_l^{(1)} V j_l \rangle}{\langle j_l, V j_l \rangle}. \tag{176}$$

Эта формула *a priori* точнее формулы борновского приближения (ур. (X.75)). В пределе, когда $\Delta_l \ll 1$, она эквивалентна борновскому приближению второго порядка, в случае же, когда величина Δ_l не мала, эта формула, зачастую, значительно точнее.

Для сравнения этих двух методов рассмотрим рассеяние s-волны прямоугольной ямой в пределе низких энергий. Возьмем

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < r_0, \\ 0 & r > r_0. \end{cases} \tag{177}$$

Будем вычислять длину рассеяния

$$a = -\lim_{k\to 0} (k \operatorname{ctg} \delta)^{-1},$$

используя упомянутые выше методы и сравнивая полученные результаты с точным ответом. Вычисления не представляют труда и, вводя обозначения $b = \left(2mV_0 r_0^2/\hbar^2\right)^{\frac{1}{2}}$, результаты можно записать следующим образом:

точный ответ $$a = -\left(\frac{\operatorname{tg} b}{b} - 1\right) r_0,$$

вариационное вычисление ((175)) $$a_{\text{var}} = -\frac{\frac{1}{3} b^2}{1 - \frac{2}{5} b^2} r_0,$$

борновское приближение $$a_B = -\frac{1}{3} b^2 r_0,$$

второе борновское приближение $$a_B^{(2)} = -\left(\frac{1}{3} b^2 + \frac{2}{15} b^4\right) r_0.$$

Критерий применимости борновского приближения выражается неравенством (43), а именно:

$$b \ll 1$$

(b является мерой глубины потенциала, т. е. числа связанных s-состояний). В табл. I приведены численные результаты, соответствующие четырем предыдущим формулам. Отметим, что a_{var} остается хорошим приближением для относительно больших значений b, включая интервал $\frac{1}{2}\pi < b < \pi$, в котором, конечно, борновское приближение не сходится.

§ 29. Распространение метода на сложные столкновения

Предыдущие методы могут быть перенесены на более общие задачи теории рассеяния. Не входя в детали всех возможных расширений, мы ограничимся рассмотрением стационарного выражения для матрицы перехода в случае упругого или неупругого рассеяния двух составных частиц.

Если не оговорено противное, то будем придерживаться обозначений раздела III. Амплитуда перехода $a \to b$ дается равенством

$$T_{a\to b} = \langle \Phi_b \,|\, V_\beta \,|\, \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} \,|\, V_\alpha \,|\, \Phi_a \rangle.$$

Таблица I

Сравнение вычисленной различными методами длины рассеяния как функции параметра $b=(2mV_0r_0^2/\hbar^2)^{1/2}$ (r_0 выбрано в качестве единицы длины)

b	Точное вычисление a	Формула стационарности (175) a_{var}	Борновское приближение	
			2-й порядок $a_B^{(2)}$	1-й порядок $a_B^{(1)}$
0	0	0	0	0
$0{,}1\pi$	$-0{,}034$	$-0{,}034$	$-0{,}034$	$-0{,}033$
$0{,}2\pi$	$-0{,}156$	$-0{,}156$	$-0{,}152$	$-0{,}132$
$0{,}3\pi$	$-0{,}460$	$-0{,}459$	$-0{,}401$	$-0{,}296$
$0{,}4\pi$	$-1{,}449$	$-1{,}428$	$-0{,}859$	$-0{,}296$
$\frac{\pi}{2}$	∞ *)	$-63{,}2$ **)	$-1{,}63$	
$0{,}6\pi$	2,63	2,81	$-2{,}9$	
$0{,}7\pi$	1,63	1,72		
$0{,}8\pi$	1,29	1,38		
$0{,}9\pi$	1,11	1,21		
π	1,00	1,12		

*) $a=\infty$ соответствует существованию связанного состояния с нулевой энергией.

**) a_{var} обращается в бесконечность и меняет знак при $b=0{,}503\pi$.

Эти выражения не стационарны по отношению к вариациям $\Psi_a^{(+)}$ или $\Psi_b^{(-)}$. Поскольку мы рассматриваем процесс рассеяния, то невозмущенные гамильтонианы равны, и можно использовать обозначения

$$H_\alpha = H_\beta = H_0, \quad V_\alpha = V_\beta = V,$$

$$G_0^{(+)} = G_0^{(-)\dagger} = [E - H_0 + i\varepsilon]^{-1}.$$

Известно, что

$$|\Phi_a\rangle = (1 - G_0^{(+)}V)\,|\Psi_a^{(+)}\rangle,$$

$$\langle\Phi_b| = \langle\Psi_b^{(-)}|\,(1 - VG_0^{(+)}).$$

Амплитуда $T_{a\to b}$ дается также выражением

$$T_{a\to b} = \frac{\langle\Psi_b^{(-)}|V|\Phi_a\rangle\langle\Phi_b|V|\Psi_a^{(+)}\rangle}{\langle\Psi_b^{(-)}|\,(V - VG_0^{(+)}V)\,|\Psi_a^{(+)}\rangle}. \tag{178}$$

Это выражение стационарно по отношению к независимым вариациям функций $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_b^{(-)}$. Оно является обобщением стационарного выражения для T_l, приведенного в § 27.

Исключая простейшие случаи, такие как столкновение двух элементарных частиц, при практическом использовании этого выражения наибольшие трудности связаны с получением явной формы функции Грина $G_0^{(+)}$. Иногда оно может быть использовано в тех рассуждениях, где явная форма $G_0^{(+)}$ не требуется. В любом случае это выражение имеет довольно ограниченную область применения.

Раздел V. ОБЩИЕ СВОЙСТВА МАТРИЦЫ ПЕРЕХОДА

Ряд свойств T-матрицы непосредственно следует из характерных свойств гамильтониана, который описывает столкновение. Некоторые из них уже отмечались в предыдущих разделах, однако не подчеркивалась их большая общность. Систематическое исследование этого вопроса будет проведено в настоящем разделе.

§ 30. Сохранение потока. S-матрица

Некоторые свойства T-матрицы являются простым следствием эрмитовости описывающего рассеяния гамильтониана H. Среди них полученные нами в § 19 интегральные представления (121) и (122). Используя тот же метод, мы получим два новых соотношения, которые называются соотношениями сохранения потока.

Используя обозначения § 19, рассмотрим две стационарных волны $\Psi_a^{(+)}$, $\Psi_b^{(+)}$ отвечающие *одной и той же* энергии E. Имеем

$$\Psi_b^{(+)*}\left(H\Psi_a^{(+)}\right) - \left(H\Psi_b^{(+)}\right)^* \Psi_a^{(+)} = 0.$$

Следовательно, величина, которая получается в левой части после суммирования по спинам и интегрирования по конечному объему в конфигурационном пространстве, равна нулю. Применяя теорему Грина, преобразуем эту величину в поверхностный интеграл, который имеет вид суммы членов, относящихся к различным каналам, в пределе, когда поверхность стремится к бесконечности (см. сноску к § 19). Находим

$$\sum_{\nu} \frac{\hbar^2}{2M_\nu} \lim_{R_\nu \to \infty} \left\{\Psi_b^{(+)*}, \Psi_a^{(+)}\right\}_\nu = 0. \tag{179}$$

Сравним левую часть этого уравнения с правой частью уравнения (119). Для вычисления заменим функции $\Psi_b^{(+)}$, $\Psi_a^{(+)}$ их

асимптотиками в каждой канале, тогда получим

$$\frac{\hbar^2}{2M_\beta}\lim_{R_\beta\to\infty}\left\{e^{-ik_b r_\beta},\ f^{(+)}_{a\beta}(\Omega_\beta)\frac{e^{ik_b r_\beta}}{r_\beta}\right\}_\beta +$$
$$+\frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\lim_{R_\alpha\to\infty}\left\{f^{(+)*}_{b\alpha}(\Omega_\alpha)\frac{e^{-ik_\alpha r_\alpha}}{r_\alpha},\ e^{ik_\alpha r_\alpha}\right\}_\alpha +$$
$$+\sum_\nu\frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to\infty}\left\{f^{(+)*}_{b\nu}(\Omega_\nu)\frac{e^{-ik_n r_\nu}}{r_\nu},\ f^{(+)}_{a\nu}(\Omega_\nu)\frac{e^{ik_n r_\nu}}{r_\nu}\right\}_\nu = 0.$$

Вычисление вклада двух первых членов проводится тем же способом, что и в § 2. Третий член представляет собой сумму по всем каналам, включая α и β, которую легко вычислить, используя определение символа $\{\ldots\}_\nu$; в отличие от вычислений § 19 вклад этого члена не равен нулю. Окончательно получаем

$$-\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta}f^{(+)}_{a\beta}(\Omega_b)+\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha}f^{(+)*}_{b\alpha}(\Omega_a)+$$
$$+\sum_\nu\frac{i\hbar^2 k_n}{M_\nu}\int f^{(+)*}_{b\nu}(\Omega_\nu)\,f^{(+)}_{a\nu}(\Omega_\nu)\,d\Omega_\nu = 0.$$

Заменяя согласно определению (114) $f(\Omega)$ матричными элементами T-матрицы, получаем

$$\langle b\,|\,T\,|\,a\rangle - \langle b\,|\,T^\dagger\,|\,a\rangle + 2\pi i\sum_\nu \rho_\nu(E)\int\langle b\,|\,T^\dagger\,|\,n\rangle\,d\Omega_\nu\,\langle n\,|\,T\,|\,a\rangle = 0. \tag{180}$$

Здесь n обозначает плоскую волну в канале ν, распространяющуюся вдоль Ω_ν, и использовано определение плотности состояний

$$\rho_\nu(E) = \frac{M_\nu k_n}{(2\pi)^3\hbar^2}.$$

С другой стороны, $T^\dagger$ определяется обычным эрмитовым сопряжением

$$\langle m\,|\,T^\dagger\,|\,n\rangle = \langle n\,|\,T\,|\,m\rangle^*.$$

Предыдущие преобразования можно проделать также, взяв вместо $\Psi^{(+)}$ волны $\Psi^{(-)}$. Тогда получим соотношение

$$\sum_\nu\frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to\infty}\{\Psi^{(-)}_a,\ \Psi^{(-)*}_b\}_\nu = 0, \tag{179'}$$

которое связано с (179) заменой a на b и $\Psi^{(+)}$ на $\Psi^{(-)*}$. Для вычисления левой части достаточно сделать необходимые подстановки в предыдущих выкладках и использовать определение

матричных элементов T (114′) вместо (114). Тогда получим

$$\langle b|T|a\rangle - \langle b|T^{\dagger}|a\rangle + 2\pi i \sum_{\nu} \rho_{\nu}(E) \int \langle b|T|n\rangle\, d\Omega_{\nu} \langle n|T^{\dagger}|a\rangle = 0. \tag{180′}$$

Приведем другое, более формальное доказательство соотношений (180) и (180′). Из соотношений

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Phi_b|V_{\beta}|\Phi_a\rangle + \langle \Phi_b|V_{\beta}\frac{1}{E-H+i\varepsilon}V_{\alpha}|\Phi_a\rangle,$$

$$\langle b|T^{\dagger}|a\rangle = \langle \Phi_b|V_{\alpha}|\Phi_a\rangle + \langle \Phi_b|V_{\beta}\frac{1}{E-H-i\varepsilon}V_{\alpha}|\Phi_a\rangle,$$

вычитая их почленно и используя свойства (124) и (А.15в), получим

$$\langle b|(T-T^{\dagger})|a\rangle = -2\pi i \langle \Phi_b|V_{\beta}\delta(E-H)V_{\alpha}|\Phi_a\rangle. \tag{181}$$

Предположим, что множество стационарных волн $\Psi_n^{(-)}$, *отвечающих непрерывному спектру* H (и дополненное множеством подходящим образом нормированных собственных векторов дискретного спектра, если последний существует), образует полное ортонормированное множество собственных векторов H и, следовательно, справедливо соотношение замкнутости

$$(2\pi)^{-3} \sum_{n} \left|\Psi_n^{(-)}\right\rangle \left\langle\Psi_n^{(-)}\right| = 1 \tag{182}$$

(суммирование проводится по всему спектру H, включая дискретный спектр). Предположим также, что и $\Psi_n^{(+)}$ удовлетворяют соотношению замкнутости

$$(2\pi)^{-3} \sum_{n} \left|\Psi_n^{(+)}\right\rangle \left\langle\Psi_n^{(+)}\right| = 1. \tag{182′}$$

Преобразуем скалярное произведение в правой части (181), используя (182), к виду

$$\langle \Phi_b|V_{\beta}\delta(E-H)V_{\alpha}|\Phi_a\rangle \equiv$$

$$\equiv (2\pi)^{-3} \sum_{n} \langle \Phi_b|V_{\beta}\left|\Psi_n^{(-)}\right\rangle \delta(E-E_n) \left\langle\Psi_n^{(-)}\right|V_{\alpha}|\Phi_a\rangle =$$

$$= \sum_{\nu} \rho_{\nu}(E) \int \langle b|T^{\dagger}|n\rangle\, d\Omega_{\nu} \langle n|T|a\rangle,$$

из которого следует соотношение (180). Таким же образом, используя (182′), можно получить соотношение (180′).

Матричные элементы T и $T^{\dagger}$ между любыми состояниями a и b удовлетворяют уравнениям (180) и (180′). Их можно записать короче

$$T - T^{\dagger} + 2\pi i T^{\dagger}T = 0, \tag{183}$$

$$T - T^{\dagger} + 2\pi i T T^{\dagger} = 0, \tag{183′}$$

подразумевая суммирование по опущенным индексам в произведениях матриц $T^{\dagger}T$ и $TT^{\dagger}$, т. е. для каждого индекса ν сле-

дует учесть множитель $\rho_\nu(E)$, дающий плотность состояний в канале ν. Заметим, что все матричные элементы здесь берутся между состояниями с энергией E.

Введем матрицу S

$$S \equiv 1 - 2\pi i T. \tag{184}$$

Эта матрица описывает столкновения при энергии E, и так же, как для T, ее матричные элементы определяются между состояниями с энергией E. Выражая T и $T^\dagger$ в уравнениях (180) и (180′) через S и $S^\dagger$, находим

$$S^\dagger S = SS^\dagger = 1. \tag{185}$$

S-матрица унитарна.

Можно также показать, что если $U(t, t')$ — оператор эволюции системы, то

$$S = \lim_{\substack{t \to +\infty \\ t' \to -\infty}} U(t, t').$$

Доказательство этого утверждения требует большой осторожности при переходе к пределам и здесь не приводится (см. 1-ю сноску к этой главе).

§ 31. Соотношение Бора — Пайерлса — Плачека (оптическая теорема)

Рассмотрим соотношение (180) в частном случае, когда $a=b$. (*N. B.* соотношения (180) и (180′) совпадают при $a=b$.) Тогда имеем

$$\langle a|T|a\rangle - \langle a|T|a\rangle^* = -2\pi i \sum_\nu \int |\langle n|T|a\rangle|^2 \rho_\nu(E)\, d\Omega_\nu. \tag{186}$$

С точностью до множителя $2\pi/\hbar v_a$ интеграл в правой части равен сечению $d\sigma_{a\to n}/d\Omega_\nu$ и, следовательно,

$$\sum_\nu \int |\langle n|T|a\rangle|^2 \rho_\nu(E)\, d\Omega_\nu = \frac{\hbar v_a}{2\pi} \sum_\nu \int \frac{d\sigma_{a\to n}}{d\Omega_\nu} d\Omega_\nu = \frac{\hbar v_a}{2\pi} \sigma_a^{\text{tot}},$$

где σ_a^{tot} — полное сечение рассеяния, соответствующее состоянию a. Возвращаясь к (186), имеем

$$\sigma_a^{\text{tot}} = -\frac{2}{\hbar v_a} \operatorname{Im} T_{aa}.$$

Для того чтобы преобразовать это выражение к более привычному виду, выразим T_{aa} в терминах амплитуды рассеяния вперед $f_{aa}^{(+)}(\Omega_a)$, которую мы обозначим $f_a(0)$ (см. ур. (114))

$$T_{aa} \equiv \langle a|T|a\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_a} f_a(0).$$

Тогда

$$\sigma_a^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k_a} \operatorname{Im} f_a(0). \tag{187}$$

Получили формулу Бора — Пайерлса — Плачека, связывающую полное сечение с мнимой частью амплитуды рассеяния вперед.

§ 32. Микрообратимость

Если H инвариантен относительно обращения времени, то матрица T удовлетворяет *соотношению микрообратимости* (см. § XV. 20)

$$T_{Kb\to Ka} = T_{a\to b}. \tag{188}$$

Это соотношение уже было доказано для случая рассеяния частицы на вещественном потенциале (§§ 3 и 14). Формальное доказательство § 14 можно также использовать и в общем случае с очень незначительными модификациями. Пусть, как и ранее, K — оператор обращения времени; начальное и конечное состояния, которые получаются из a и b обращением времени (изменение знаков импульсов и спинов), обозначим Ka и Kb соответственно

$$\Phi_{Kb} \equiv K\Phi_b, \qquad \Phi_{Ka} \equiv K\Phi_a.$$

Для доказательства соотношения (188) используем выражение (142), которое определяет амплитуду интересующего нас перехода:

$$T_{Kb\to Ka} = \langle \Phi_{Ka} | \left[V_\alpha + V_\alpha \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\beta \right] | \Phi_{Kb} \rangle =$$
$$= \left(\langle \Phi_a | K^+ \right) \left[V_\alpha + V_\alpha \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\beta \right] (K | \Phi_b \rangle).$$

Поскольку K — антиунитарный оператор, коммутирующий с H, V_α и V_β, то получаем

$$T_{Kb\to Ka} = \langle \Phi_b | \left[V_\alpha + V_\beta \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\alpha \right] | \Phi_a \rangle =$$
$$= \langle \Phi_b | \left[V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H + i\varepsilon} V_\alpha \right] | \Phi_a \rangle.$$

Вторая строчка следует из (124) и равна согласно (142) амплитуде $T_{a\to b}$.

Возводя обе части (188) в квадрат и переписывая результат в терминах сечений $d\sigma_{a\to b}/d\Omega_\beta$ и $d\sigma_{Kb\to Ka}/d\Omega_\alpha$, получаем соотношение микрообратимости для сечений

$$v_b \, d\sigma_{Kb\to Ka}/\rho_a(E)\, d\Omega_\alpha = v_a \, d\sigma_{a\to b}/\rho_b(E)\, d\Omega_\beta. \tag{189}$$

Здесь мы использовали тот факт, что $v_{Kb} = v_b$, $\rho_{Ka} = \rho_a$. Из определения скорости и плотности состояний (ур. (XVII. 52)) для каждого канала имеем равенства

$$v_n \rho_n = p_n^2/(2\pi\hbar)^3 = k_n^2/(2\pi)^3\,\hbar.$$

Следовательно, соотношение (189) можно переписать, при условии, что $d\Omega_\alpha = d\Omega_\beta = d\Omega$, следующим образом:

$$k_b^2\, d\sigma_{Kb\to Ka} = k_a^2\, d\sigma_{a\to b}. \tag{190}$$

§ 33. Свойства инвариантности T-матрицы

Исследуем теперь следствия инвариантности H по отношению к вращениям, отражениям и вообще к преобразованиям, которые представляются унитарными операторами.

Если H, H_α и H_β инвариантны относительно данного унитарного преобразования X, то справедливо соотношение (ср. § XV. 13)

$$T_{Xa\to Xb} = T_{a\to b}. \tag{191}$$

(*N. B.* Это соотношение отличается от соотношения микрообратимости по содержанию реакции, описываемой амплитудой в левой части.)

Для доказательства (191) необходимо только заметить, что согласно определению (144) оператор $T^{\beta\alpha}$ также инвариантен относительно преобразования X

$$X^+ T^{\beta\alpha} X = T^{\beta\alpha},$$

и, следовательно,

$$T_{Xa\to Xb} \equiv \langle \Phi_b \,|\, X^+ T^{\beta\alpha} X \,|\, \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b \,|\, T^{\beta\alpha} \,|\, \Phi_a \rangle \equiv T_{a\to b}.$$

Из (191) легко получить следующее соотношение для сечений:

$$d\sigma_{Xa\to Xb} = d\sigma_{a\to b}, \tag{192}$$

которое подобно соотношению (190).

Предположим теперь, что полный гамильтониан H и различные «невозмущенные» гамильтонианы H_α, H_β, ..., инвариантны относительно преобразований некоторой группы G. Как мы увидим, это приведет к некоторым свойствам T-матрицы, аналогичным тем, которые были получены в § XV. 11 для матриц, задающих наблюдаемые, инвариантные по отношению к G.

Будем использовать обозначения § XV. 11 и рассмотрим два определенных там множества наблюдаемых J и M. Пусть ν — один из каналов, открытый для столкновений при энергии E. Операторы H_ν, J и M образуют набор коммутирующих наблю-

даемых. Обозначим через $|\nu E_\nu \tau_\nu j\mu\rangle$ векторы общего базиса (мы будем предполагать, что это стандартный базис, отвечающий группе G, хотя такое ограничение несущественно). Индекс ν соответствует рассматриваемому каналу, E_ν — собственное значение H_ν, j и μ обозначают собственные значения J и M соответственно, τ_ν — дополнительное квантовое число, которое меняется в области, зависящей от значений E_ν, j и μ. Векторы $|\nu E_\nu \tau_\nu j\mu\rangle$ ортонормированы

$$\langle \nu E_\nu \tau_\nu j\mu \,|\, \nu E'_\nu \tau'_\nu j'\mu'\rangle = \delta(E_\nu - E'_\nu)\,\delta_{\tau_\nu\tau'_\nu}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}.$$

Будем для простоты считать индекс τ_ν дискретным. Так обстоит дело в случае 2-частичного канала, если G — группа вращений или содержит ее как подгруппу. Тогда τ_ν принимает конечное число дискретных значений.

Рассмотрим столкновение при фиксированной энергии E и переход из некоторого канала ν в другой канал ν'; согласно высказанной выше гипотезе соответствующий оператор $T^{\nu\nu'}$ (определение (144)) инвариантен относительно преобразований из группы G. Как очевидное обобщение свойства (XV. 52) имеем

$$\langle \nu E \tau_\nu j\mu \,|\, T^{\nu\nu'} \,|\, \nu' E \tau_{\nu'} j'\mu'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}\langle \nu\tau_\nu \,|\, T^{(j)} \,|\, \nu'\tau_{\nu'}\rangle, \qquad (193)$$

где $\langle \nu\tau_\nu \,|\, T^{(j)} \,|\, \nu'\tau_{\nu'}\rangle$ зависит от квантовых чисел j, τ_ν и $\tau_{\nu'}$ и не зависит от μ. Все следствия, вытекающие из инвариантности по отношению к группе G, содержатся в уравнении (193).

Следовательно, каждой паре $(\nu\nu')$ открытых каналов соответствует некоторое число коэффициентов $\langle \nu\tau_\nu \,|\, T^{(j)} \,|\, \nu'\tau_{\nu'}\rangle$. Те из коэффициентов, которые отвечают данному значению j (j и E фиксированы; ν, τ_ν, ν' и $\tau_{\nu'}$ меняются), образуют квадратную матрицу, которую мы обозначим $T^{(j)}$. Она аналогична T-матрице, только ее размерность, как правило, значительно меньше. В частности, если G содержит группу вращений, а во всех открытых каналах имеется не более двух частиц, то $T^{(j)}$ — конечная матрица; если же открыт только один канал и обе частицы бесспиновые, то $T^{(j)}$ — одномерна, т. е. представляет собой число, равное с точностью до легко определяемого множителя коэффициенту T_j в разложении (51).

Легко разложить амплитуду перехода $T_{a\to b}$ в ряд из матриц $T^{(j)}$. Для этого рассмотрим формулу (145), которую мы преобразуем, используя соотношения полноты для стандартных базисов, отвечающих каналам α и β, и свойство (193). Коэффициенты разложения зависят от проекций плоских волн Φ_a и Φ_b на базисные векторы. Обозначая Φ_n плоскую волну с энергией E в канале ν, можно записать:

$$\langle \Phi_n \,|\, \nu E_\nu \tau_\nu j\mu\rangle = \delta(E - E_\nu)\,\langle \Phi_n \,|\, \nu\tau_\nu j\mu\rangle. \qquad (194)$$

Используя это обозначение, после небольших вычислений находим

$$T_{a\to b} = \sum_{j,\mu} \sum_{\tau_\alpha, \tau_\beta} \langle \Phi_b | \beta\tau_\beta j\mu \rangle \langle \beta\tau_\beta | T^{(l)} | \alpha\tau_\alpha \rangle \langle \alpha\tau_\alpha j\mu | \Phi_a \rangle. \qquad (195)$$

Полученное разложение обобщает (51). Как и последнее, оно особенно полезно в случае быстрой сходимости; это верно для ядерных столкновений, когда длина волны во входном и выходном каналах велика по сравнению с радиусом действия ядерных сил, именно в такой ситуации разложение (195) используется чаще всего (см. 1-ю сноску к § 16).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Доказать асимптотическое свойство

$$\exp(i\boldsymbol{qr}) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{2\pi}{iqr}\left[\delta(\Omega_r - \Omega_q)\, e^{iqr} - \delta(\Omega_r + \Omega_q)\, e^{-iqr}\right] + O\left(\frac{1}{r^2}\right):$$

(i) используя разложение плоской волны по сферическим функциям и соотношение полноты для последних;

(ii) исследуя непосредственно асимптотику

$$\int \exp(i\boldsymbol{qr})\, \varphi(\Omega_r)\, d\Omega_r$$

($\varphi(\Omega)$ — непрерывная функция направления $\Omega \equiv (\theta\ \varphi)$; Ω_r и Ω_q — направления, соответствующие векторам $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{q}$).

2. Показать, что для двух плоских волн $\exp(i\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{r})$, $\exp(i\boldsymbol{q}_2\boldsymbol{r})$ с одинаковой длиной волны ($q_1 = q_2$) справедливо точное равенство

$$\{\exp(i\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{r}),\ \exp(i\boldsymbol{q}_2\boldsymbol{r})\} = 0,$$

каково бы ни было R (определение $\{\ldots\}$ см. в § 2).

3. Вычислить сечение рассеяния в борновском приближении:

(i) для прямоугольной ямы глубины V_0 и радиуса a;

(ii) для гауссова потенциала

$$V = V_0 \exp(-r^2/a^2);$$

(iii) для потенциала Юкавы

$$V = \frac{V_0 \exp(-Kr)}{Kr}.$$

Оправдать для этих трех частных случаев утверждения § 4, относящиеся к общему виду высокоэнергетического углового распределения; определить асимптотический вид полного сечения.

4. Рассмотрим гамильтониан частицы массы m в поле короткодействующего потенциала $V(r)$, $\left(rV \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} 0\right)$

$$H \equiv -(\hbar^2/2m)\,\Delta + V(r).$$

При энергии $E = \hbar^2 k^2/2m$ и моменте l радиальное уравнение имеет вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V + k^2\right] y_l = 0.$$

Обозначим $F_l(k; r)$ регулярное решение, $u_l^{(+)}(k; r)$ и $u_l^{(-)}(k; r)$ — «уходящее» и «приходящее» решения соответственно. Эти решения нормированы так, что

$$F_l(k; r) \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr - \frac{1}{2} l\pi + \delta_l\right),$$

$$u_l^{(\pm)}(k; r) \underset{r\to\infty}{\sim} \exp\left[\pm i\left(kr - \frac{1}{2} l\pi\right)\right].$$

(i) Показать, что стационарные волны $\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}$ (определения § 2) даются следующими формулами:

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)} = \frac{4\pi}{kr} \sum_{lm} i^l \exp(\pm i\delta_l)\, Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})\, Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}})\, F_l(k; r),$$

(ii) Показать, что функции $G^{\pm}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, определяемые формулами

$$\frac{\hbar^2}{2m} G^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{1}{krr'} \sum_{lm} \exp(\pm i\delta_l)\, Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}})\, Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}')\, F_l(k; r_<)\, u_l^{(\pm)}(k; r_>)$$

являются функциями Грина оператора $E - H$, т. е. симметричными по $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{r}'$ функциями, удовлетворяющими уравнению

$$(E - H)\, G^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

а их асимптотическое поведение имеет вид

$$G^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{\exp(\pm ikr)}{r} \Psi_{\pm\boldsymbol{k}}^{(\mp)}(\boldsymbol{r}') \qquad (\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{r}/r).$$

(Формулы справедливы также и для потенциалов V с асимптотическим поведением $1/r$, если подходящим образом определить F_l и $u_l^{(\pm)}$; соответствующие изменения произойдут и в асимптотике $G^{(\pm)}$.)

5. Доказать формулу (151).

«Я черна, но собою прекрасна..»
(*Песнь песней*, 1. 5)

ЧАСТЬ V

ЭЛЕМЕНТЫ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ГЛАВА XX
УРАВНЕНИЕ ДИРАКА

Раздел I. ОБЩЕЕ ВВЕДЕНИЕ

§ 1. Релятивистская квантовая механика [1])

В предыдущих главах в основе всех вычислений в квантовой теории лежало уравнение Шредингера. Это уравнение, полученное из гамильтонова формализма нерелятивистской классической механики по принципу соответствия, обладает всеми свойствами инвариантности функции Гамильтона, из которой оно получено. В частности, для изолированной системы оно инвариантно относительно пространственных вращений и трансляций. Можно также показать, что оно инвариантно относительно преобразований Галилея (см. задачу XV. 7). Следовательно, физические свойства, которые предсказывает теория Шредингера, инвариантны относительно галилеевских преобразований системы координат, но не инвариантны относительно преобразований Лоренца, как того требует принцип относительности. Поскольку преобразование Галилея получается из преобразования Лоренца при скоростях, малых по сравнению со скоростью света, естественно ожидать, что упомянутая теория будет корректно описывать явления только при скоростях $v \ll c$ (это подтверждается экспериментально). В частности, все явления, которые включают взаимодействие света и вещества, такие как излучение, поглощение или рассеяние фотонов, находятся вне рамок нерелятивистской квантовой механики.

Одна из основных трудностей, которые возникают при построении релятивистской квантовой механики, связана с тем, что нарушается закон сохранения числа частиц. В силу эквивалентности энергии и массы (одно из важнейших следствий принципа относительности) возможно рождение или поглощение частиц всякий раз, как только при взаимодействии происходит передача энергии, равной или превосходящей энергию покоя этих частиц. Таким образом, полная релятивистская квантовая теория должна содержать в единой схеме динамические состояния,

[1]) Для чтения этой главы рекомендуется ознакомиться с разделами I и II Дополнения Г.

отличающиеся не только квантовым состоянием, но также видом и *числом* элементарных частиц, которым эти состояния соответствуют. Для этого необходимо обратиться к концепции квантованного поля, в связи с чем релятивистскую квантовую теорию часто называют теорией квантованных полей или квантовой теорией поля. В том состоянии, в котором эта теория находится в настоящее время, она не свободна ни от трудностей, ни даже от противоречий, но способна объяснить множество экспериментальных фактов.

Последняя, пятая часть этой книги служит введением в теорию квантованных полей и дает элементарные методы вычисления ряда релятивистских эффектов, относящихся к динамике электрона и взаимодействию электромагнитного поля с заряженными частицами.

Эта часть состоит из двух глав.

В настоящей главе рассматривается простейшая задача релятивистской квантовой механики: частица спина 1/2 в заданном внешнем поле. Наиболее важным примером такой ситуации является электрон в электромагнитном поле. Поле не квантуется, и эволюция системы должна описываться волновым уравнением, которое обладает всеми свойствами инвариантности, вытекающими из принципа относительности. Уравнение должно удовлетворять также принципу соответствия и в нерелятивистском приближении давать теорию Паули. Такое уравнение существует и называется уравнением Дирака. После краткого обзора группы Лоренца и релятивистской классической динамики (раздел I) мы приводим уравнение Дирака (раздел II) и подробно исследуем его свойства инвариантности (раздел III). В оставшейся части этой главы мы обсуждаем физическое содержание теории и, рассматривая основные приложения уравнения Дирака, исследуем его связь с классической динамикой (раздел IV), нерелятивистской квантовой механикой (раздел V) и квантовой теорией поля (раздел VI).

Вторая глава посвящена концепции квантованного поля, элементарной квантовой теории электромагнитного излучения и его взаимодействию с атомными и ядерными системами.

§ 2. Обозначения и различные определения

Единицы. За редким исключением мы будем пользоваться системой единиц, в которой

$$\hbar = c = 1$$

и, следовательно, время имеет размерность длины, энергия, импульс и масса имеют размерность обратной длины, а электрический заряд является безразмерной величиной ($e^2 = e^2/\hbar c =$

$= 1/137$). Общие выражения могут быть легко восстановлены из соображений однородности.

Координаты. Задание момента времени t и точки $\boldsymbol{r} \equiv (x, y, z)$ обычного пространства определяет точку пространства-времени. Обозначим координаты этой точки x^0, x^1, x^2, x^3; $x^0 \equiv ct$ — координата времени, а x^1, x^2, x^3 — три пространственных координаты: $x^1 \equiv x$, $x^2 \equiv y$, $x^3 \equiv z$. Мы будем использовать индексы 0, 1, 2, 3 для обозначения компонент четырехмерных векторов [1]) и тензоров по осям 0, 1, 2, 3 соответственно. Пространственно-временные компоненты 4-векторов или тензоров будем обозначать греческими буквами. Эти индексы могут принимать четыре значения: 0, 1, 2, 3; латинские буквы будем использовать для обозначения компонент в обычном пространстве, они могут принимать значения 1, 2, 3. Таким образом:

$$x^\mu \equiv (x^0, x^k) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3),$$
$$(\mu = 0, 1, 2, 3), \quad (k = 1, 2, 3).$$

Метрический тензор, ковариантные и контравариантные индексы. Пространство-время имеет псевдоевклидову метрику, которая задается *метрическим тензором*

$$g_{\mu\nu} = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix},$$

или иначе

$$g_{00} = 1, \quad g_{kk} = -1, \quad g_{\mu\nu} = 0, \quad \text{если} \quad \mu \neq \nu. \tag{1}$$

Следует различать *ковариантные* векторы (которые преобразуются как $\partial/\partial x^\mu$) и *контравариантные* векторы (которые преобразуются как x^μ), а также ковариантные и контравариантные компоненты тензоров. Следуя общепринятому соглашению, ковариантные индексы пишут внизу, а контравариантные — наверху. Так, a^μ означает контравариантный вектор. Соответствующий ковариантный вектор получается применением метрического тензора:

$$a_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu,$$

что дает

$$a_0 = a^0, \quad a_k = -a^k.$$

---

[1]) Для краткости также будем писать 4-вектор, 4-тензор.

Мы будем пользоваться *соглашением о суммировании по повторяющимся индексам.* При этом предыдущее выражение примет компактный вид

$$a_\mu = g_{\mu\nu}a^\nu.$$

Операция поднятия индексов осуществляется применением тензора $g^{\mu\nu}$

$$a^\mu = g^{\mu\nu}a_\nu.$$

В данном случае мы имеем

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}.$$

Кроме того,

$$g^\nu_\mu = g_{\mu\rho}g^{\rho\nu} = g^\mu_\nu = \delta^\nu_\mu,$$

где δ^ν_μ — символ Кронекера

$$\delta^\nu_\mu = \begin{cases} 1, & \text{если } \mu = \nu, \\ 0, & \text{если } \mu \neq \nu. \end{cases}$$

Трехмерные векторы, четырехмерные векторы, скалярное произведение. Мы сохраним обозначения, которыми пользовались ранее, для векторов обычного пространства или 3-векторов, обозначая вектор буквой жирного шрифта, а его длину — той же буквой обычного шрифта.

Три пространственных компоненты вектора a^μ образуют 3-вектор. Используя принятые обозначения, имеем следующее:

$$a^\mu \equiv (a^0, a^1, a^2, a^3) \equiv (a^0, \boldsymbol{a}), \quad \boldsymbol{a} \equiv (a_x, a_y, a_z),$$

$$a^1 = a_x, \quad a^2 = a_y, \quad a^3 = a_z, \quad a \equiv (\boldsymbol{aa})^{\frac{1}{2}} \equiv [a_x^2 + a_y^2 + a_z^2]^{\frac{1}{2}}.$$

Иногда мы будем обозначать 4-вектор a^μ просто a, когда это не приведет к путанице с длиной 3-вектора $\boldsymbol{a}$.

Скалярное произведение двух 4-векторов a^μ и b^μ получается при свертке контравариантных компонент одного с ковариантными компонентами другого, т. е. $a_\mu b^\mu$ или $a^\mu b_\mu$

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \boldsymbol{ab}. \tag{2}$$

Норма вектора a^μ равна $a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - \boldsymbol{a}^2$.

Классификация 4-векторов. Четырехмерные векторы можно разделить на три класса в соответствии со знаком их нормы:

$a_\mu a^\mu < 0$ a^μ — пространственно-подобный вектор,

$a_\mu a^\mu = 0$ a^μ — нуль-вектор,

$a_\mu a^\mu > 0$ a^μ — времениподобный вектор.

Эта классификация соответствует положению вектора по отношению к световому конусу $x_\mu x^\mu = 0$. Два последних случая можно классифицировать в зависимости от знака временной компоненты:

$a^0 > 0$ — вектор направлен в будущее,

$a^0 < 0$ — вектор направлен в прошлое.

Градиент. Дифференциальные операторы. Мы сохраним обозначения $\nabla \equiv (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ и $\Delta \equiv \nabla\nabla$.

Четыре оператора частных производных $\partial/\partial x^\mu$ образуют *ковариантный* вектор, который мы обозначим символом ∂_μ:

$$\partial_\mu \equiv \partial/\partial x^\mu \equiv (\partial/\partial x^0, \partial/\partial x^1, \partial/\partial x^2, \partial/\partial x^3) \equiv (\partial/\partial ct, \nabla). \tag{3}$$

Это оператор градиента.

Мы будем использовать также «контравариантный градиент»

$$\partial^\mu \equiv g^{\mu\nu}\partial_\nu \equiv (\partial/\partial ct, -\nabla). \tag{4}$$

Определим оператор Даламбера [1]) (ср. § II. 12)

$$\Box \equiv \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \equiv \partial_\mu\partial^\mu. \tag{5}$$

Тензор $\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$. Тензор $\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$ определяется как полностью антисимметричный тензор, компоненты которого равны 0, если какие-либо два индекса совпадают, $+1$, если $(\lambda\mu\nu\rho)$ образуют четную перестановку индексов (0, 1, 2, 3), и -1, если $(\lambda\mu\nu\rho)$ образуют нечетную перестановку.

Электромагнитное поле. Электромагнитный потенциал состоит из векторной $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ и скалярной $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ частей, которые образуют четырехмерный вектор A^μ

$$A^\mu \equiv (\varphi, \boldsymbol{A}). \tag{6}$$

Электрическое $\mathscr{E}$ и магнитное $\mathscr{H}$ поля определяются по формулам

$$\mathscr{E} = -\nabla\varphi - \partial\boldsymbol{A}/\partial x^0, \quad \mathscr{H} = \operatorname{rot}\boldsymbol{A}. \tag{7}$$

Компоненты векторов $\mathscr{E}$ и $\mathscr{H}$ образуют антисимметричный тензор $F_{\mu\nu}$ в пространстве-времени согласно определению

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}, \tag{8}$$

что дает

$$F_{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \mathscr{E}_x & \mathscr{E}_y & \mathscr{E}_z \\ -\mathscr{E}_x & 0 & -\mathscr{H}_z & \mathscr{H}_y \\ -\mathscr{E}_y & \mathscr{H}_z & 0 & -\mathscr{H}_x \\ -\mathscr{E}_z & -\mathscr{H}_y & \mathscr{H}_x & 0 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

[1]) Ряд авторов использует обозначение $\Box$ для оператора, отличающегося от введенного нами знаком.

Мы будем использовать также векторный оператор

$$D_\mu \equiv \partial_\mu + ieA_\mu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^0} + ie\varphi,\ \nabla - ie\boldsymbol{A}\right). \tag{10}$$

§ 3. Группа Лоренца

Преобразованием Лоренца системы координат называется *вещественное*, *линейное* преобразование координат, *сохраняющее норму* пространственно-временного интервала. Новые координаты x'^μ точки в пространстве-времени получаются из старых x^μ по формулам

$$x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu + a^\mu.$$

Вещественный вектор a^μ определяет трансляцию пространственно-временных осей. В дальнейшем преобразования трансляций мы будем рассматривать отдельно, а преобразованиями Лоренца назовем однородные преобразования ($a^\mu = 0$)[1])

$$x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu. \tag{11}$$

Поднимая или опуская индексы у матрицы Ω^μ_ν, можно получить матрицы Ω^ν_μ, $\Omega^{\mu\nu}$, $\Omega_{\mu\nu}$ (например, $\Omega^{\mu\nu} = g^{\nu\rho}\Omega^\mu_\rho$). Задание одной из этих матриц определяет преобразование Лоренца. Условия вещественности и инвариантности нормы имеют вид

$$\Omega^*_{\mu\nu} = \Omega_{\mu\nu}, \tag{12}$$

$$\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\lambda} = \Omega_{\nu\mu}\Omega^{\lambda\mu} = \delta^\lambda_\nu. \tag{13}$$

Следовательно,

$$\det\left|\Omega^\mu_\nu\right| = \pm 1 \tag{14}$$

и обратное преобразование можно записать в виде

$$x^\mu = x'^\nu \Omega^\mu_\nu. \tag{15}$$

Такие преобразования образуют *полную группу Лоренца*: группу вещественных линейных преобразований, сохраняющих скалярное произведение четырехмерных векторов.

Если $\Omega^{00} > 0$, то преобразование сохраняет знак временной компоненты времениподобных векторов. Такие преобразования называются ортохронными, они образуют *ортохронную группу Лоренца*.

Если *дополнительно* и $\det\left|\Omega^\mu_\nu\right| = 1$, то преобразование сохраняет ориентацию (правую или левую) осей координат в обычном пространстве. Множество таких преобразований об-

[1]) Группа, образованная преобразованиями Лоренца и трансляциями, обычно называется *неоднородной группой Лоренца* или группой Пуанкаре.

разует *собственную группу Лоренца*, которую мы будем обозначать $\mathscr{L}_0$.

Преобразования собственной группы Лоренца можно рассматривать как последовательность бесконечно малых преобразований. Матрица $\Omega_{\mu\nu}$ *бесконечно малого преобразования* имеет вид

$$g_{\mu\nu} + \omega_{\mu\nu},$$

где величины $\omega_{\mu\nu}$ являются бесконечно малыми. Условия (12) и (13) дают

$$\omega_{\mu\nu} = \omega^*_{\mu\nu}, \quad \omega_{\mu\nu} + \omega_{\nu\mu} = 0. \tag{16}$$

Следовательно, $\omega_{\mu\nu}$ — вещественный антисимметричный тензор.

Положим

$$Z^{(\alpha\beta)}_{\mu\nu} = -Z^{(\beta\alpha)}_{\mu\nu} = g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta} - g_{\mu\beta}g_{\nu\alpha}. \tag{17}$$

Тензор $Z^{(\alpha\beta)}_{\mu\nu}$ — антисимметричен и имеет две отличных от нуля компоненты: $\mu = \alpha$, $\nu = \beta$ и $\mu = \beta$, $\nu = \alpha$, одна из которых равна $+1$, а другая -1. Пусть ε есть бесконечно малая величина, тогда

$$g_{\mu\nu} - \varepsilon Z^{(\alpha\beta)}_{\mu\nu}$$

есть матрица бесконечно малого преобразования Лоренца, отвечающего «вращению» на угол ε в плоскости $x^\alpha x^\beta$.

Существует шесть бесконечно малых преобразований такого вида. «Вращения» в плоскостях x^1x^2, x^2x^3 и x^3x^1 есть вращения на угол ε в пространстве вокруг осей Oz, Ox, Oy соответственно. «Вращения» в плоскостях x^1x^0, x^2x^0, x^3x^0 представляют собой специальные преобразования Лоренца (переход к движущейся системе координат со скоростью ε в направлении Ox, Oy, Oz соответственно [1]).

Кроме бесконечно малых преобразований можно определить преобразования различных отражений: пространственного отражения s ($x^0 = x^0$, $x^k = -x^k$) и отражения времени t ($x^0 = -x^0$, $x^k = x^k$). Ортохронная группа состоит из группы

---

[1]) Если новые координаты получены из старых вращением на конечный угол φ вокруг оси Oz, то имеем

$$x'^1 = x^1\cos\varphi + x^2\sin\varphi, \quad x'^2 = x^2\cos\varphi - x^1\sin\varphi, \quad x'^3 = x^3, \quad x'^0 = x^0.$$

Если они получены из старых при специальном преобразовании Лоренца со скоростью $v = \operatorname{tg}\varphi$, направленной вдоль Ox, то имеем

$$x'^1 = x^1\operatorname{ch}\varphi - x^0\operatorname{sh}\varphi, \quad x'^0 = x^0\operatorname{ch}\varphi - x^1\operatorname{sh}\varphi, \quad x'^2 = x^2, \quad x'^3 = x^3.$$

Рассмотренные выше преобразования отвечают случаю, когда $\varphi = \varepsilon$ — бесконечно малой величине.

Таблица I

	$\mathrm{Det}\left\|\Omega_\nu^\mu\right\|$	Ω^{00}	Обозначения группы
$\mathscr{L}_0$	$+1$	>0	собственная ортохронная полная
$s\mathscr{L}_0$	-1	>0	
$t\mathscr{L}_0$	-1	<0	
$st\mathscr{L}_0$	$+1$	<0	

$\mathscr{L}_0$, отражения s и преобразований из произведения $s\mathscr{L}_0$. Полная группа образована преобразованиями из $\mathscr{L}_0$, $s\mathscr{L}_0$, $t\mathscr{L}_0$ и $st\mathscr{L}_0$. Свойства этих четырех подмножеств полной группы приведены в табл. I.

§ 4. Классическая релятивистская динамика

Напомним динамические свойства классической релятивистской частицы с массой покоя m и с зарядом e в электромагнитном поле $(\varphi, \boldsymbol{A})$.

Обозначим $\boldsymbol{v}$ скорость частицы

$$\boldsymbol{v} \equiv \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}. \tag{18}$$

Определим релятивистскую массу M и механический импульс [1]) $\boldsymbol{\pi}$:

$$M \equiv \frac{m}{\sqrt{1-\boldsymbol{v}^2}}, \quad \boldsymbol{\pi} \equiv M\boldsymbol{v}. \tag{19}$$

Набор $(M, \boldsymbol{\pi})$ есть 4-вектор, норма которого равна

$$M^2 - \boldsymbol{\pi}^2 = m^2 \tag{20}$$

и который направлен в будущее $(M > 0)$.

Если нет внешнего поля, то частица двигается равномерно и прямолинейно: $\boldsymbol{v}$ есть величина постоянная.

Во внешнем электромагнитном поле траектория частицы удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\boldsymbol{\pi}}{dt} = e[\mathscr{E} + \boldsymbol{v} \times \mathscr{H}] \equiv \boldsymbol{F}. \tag{21}$$

Это основное уравнение релятивистской динамики материальной точки. Вектор $\boldsymbol{F}$ называется *силой Лоренца*.

[1]) Не путать с импульсом, который в этой книге определяется как переменная, канонически сопряженная к координате (см. примечание на стр. 62 тома 1).

Из уравнения (21) следуют уравнения:

$$\frac{dM}{dt} = (\boldsymbol{v}\boldsymbol{F}) = e(\boldsymbol{v}\boldsymbol{\mathscr{E}}), \tag{21'}$$

$$\frac{d}{dt}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\pi}) = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F}, \tag{22}$$

которые определяют зависимости от времени массы и момента количества движения.

Если определить собственное время τ частицы по формуле

$$d\tau = (dx^\mu\, dx_\mu)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{1 - \boldsymbol{v}^2}\, dt,$$

то приведенные соотношения можно записать в ковариантной форме. Определим 4-скорость

$$u^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{d\tau} \equiv \left(\frac{dt}{d\tau}, \frac{\boldsymbol{v}\, dt}{d\tau}\right) \qquad (u^\mu u_\mu = 1),$$

умножение которой на m дает механический 4-импульс

$$\pi^\mu \equiv mu^\mu \equiv (M, \boldsymbol{\pi}).$$

Уравнения (21) и (21′) эквивалентны формально ковариантному уравнению

$$\frac{d\pi^\mu}{d\tau} = eF^{\mu\nu}u_\nu \tag{23}$$

или

$$\frac{du^\mu}{d\tau} = \frac{e}{m}F^{\mu\nu}u_\nu,$$

где $F^{\mu\nu}$ — тензор электромагнитного поля (ур. (8)—(9)).

Приведенные уравнения движения можно вывести в рамках лагранжева или гамильтонова формализма (см. задачу I. 5). Импульс $\boldsymbol{p}$ и энергия E образуют 4-вектор p^μ, который связан с π^μ соотношением

$$p^\mu = \pi^\mu + eA^\mu, \tag{24}$$

т. е.

$$E = M + e\varphi, \quad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{\pi} + e\boldsymbol{A}.$$

Функция Гамильтона равна

$$H \equiv e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}, \tag{25}$$

что согласуется с соотношениями (24) и (20). Используя это равенство, получаем гамильтоновы канонические уравнения

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \frac{\boldsymbol{\pi}}{M}, \quad \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -e\,\mathrm{grad}\,(\varphi - \boldsymbol{v}\boldsymbol{A}).$$

Первое уравнение есть определение скорости, а второе эквивалентно уравнению (21), что легко установить, используя определения $\mathscr{E}$ и $\mathscr{H}$ (ур. (7)) и равенство

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\,\mathrm{grad}\right)\boldsymbol{A}.$$

Раздел II. УРАВНЕНИЯ КЛЕЙНА — ГОРДОНА И ДИРАКА

§ 5. Уравнение Клейна — Гордона

Построение релятивистского волнового уравнения для электрона является сложной задачей из-за наличия у электрона спина. Найдем вначале релятивистское волновое уравнение для частицы спина 0, например, π-мезона. Такая частица не имеет внутренних степеней свободы и ее волновая функция Ψ может зависеть только от $\boldsymbol{r}$ и t. Обозначим массу частицы m, заряд e и предположим, что она находится во внешнем электромагнитном поле $A^\mu \equiv (\varphi, \boldsymbol{A})$.

При выводе волнового уравнения будем действовать эмпирически, руководствуясь принципом соответствия. Это гарантирует нам получение классических уравнений движения в случае, когда справедливо квазиклассическое приближение.

Напомним правило соответствия Шредингера

$$E \to i\frac{\partial}{\partial t}, \quad \boldsymbol{p} \to -i\nabla. \tag{26}$$

Вводя $p^\mu \equiv (E, \boldsymbol{p})$, получаем

$$p^\mu \to i\partial^\mu. \tag{26'}$$

Из выражения (25) для гамильтониана имеем

$$E = e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}, \tag{27}$$

откуда, используя (26), следует волновое уравнение

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)\Psi = \left[\left(\frac{1}{i}\nabla - e\boldsymbol{A}\right)^2 + m^2\right]^{\frac{1}{2}}\Psi.$$

Данное уравнение обладает двумя серьезными недостатками. Во-первых, асимметрия пространственных и временной координат не позволяет увидеть явной релятивистской инвариантности. Во-вторых, в правой части стоит квадратный корень, которому трудно придать смысл оператора, за исключением случая $\boldsymbol{A} = 0$.

Оба недостатка исчезают, если в качестве исходной точки выбрать соотношение (20), которое дает

$$(E - e\varphi)^2 - (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 = m^2. \tag{28}$$

Это соотношение эквивалентно более общему соотношению, чем (27)

$$E = e\varphi \pm \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}. \qquad (29)$$

Классическим решениям отвечает знак «+»; знак «—» дает *решения с отрицательной массой, что не имеет физического смысла.* Таким образом, выбирая в качестве исходного соотношение (28), мы вводим *лишние решения с отрицательной массой.*

Применение правила соответствия к (28) дает *уравнение Клейна — Гордона*

$$\left[\left(i\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2 - \left(\frac{1}{i}\nabla - e\boldsymbol{A}\right)^2\right]\Psi = m^2\Psi, \qquad (30)$$

которое можно также записать в явно релятивистски инвариантном виде

$$(D_\mu D^\mu + m^2)\,\Psi \equiv \left[(\partial_\mu + ieA_\mu)(\partial^\mu + ieA^\mu) + m^2\right]\Psi = 0. \qquad (30')$$

Рассмотрим кратко интерпретацию этого уравнения [1]). Ограничимся для простоты случаем, когда внешнее поле равно нулю. Уравнение приобретает простой вид (см. § II. 12)

$$(\Box + m^2)\,\Psi = 0. \qquad (31)$$

Это дифференциальное уравнение второго порядка по времени и для определения Ψ при всех временах необходимо знать в начальный момент как Ψ, так и $\partial\Psi/\partial t$. Возникшую трудность легко обойти, если постулировать, что динамическое состояние системы в данный момент определяется не одной функцией Ψ, а двумя — Ψ и $\partial\Psi/\partial t$ или их линейными комбинациями

$$\Phi = \Psi + \frac{i}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad \chi = \Psi - \frac{i}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t}.$$

Иначе говоря, состояние системы определяется волновой функцией с двумя компонентами Φ и χ. Такая волновая функция удовлетворяет дифференциальному уравнению первого порядка по времени, которое легко получить из уравнения Клейна — Гордона. В нерелятивистском пределе энергия частицы приблизительно равна ее массе покоя m и

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} \approx m\Psi,$$

следовательно, $\chi \ll \Phi$. Одна из компонент становится пренебрежимо малой по отношению к другой, и мы получаем нереля-

[1]) Более полное изложение содержится в статье *H. Feshbach, F. Villars.* Rev. Mod. Phys. 30, 24 (1958).

тивистскую теорию Шредингера, в которой динамическое состояние частицы со спином 0 определяется однокомпонентной волновой функцией.

Для интерпретации волновой функции необходимо определить плотность вероятности положения частицы P и плотность вероятности потока j, которые удовлетворяют уравнению непрерывности (см. § IV. 4)

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla j = 0, \tag{32}$$

или, вводя обозначение $j^\mu \equiv (P, j)$, получим

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \tag{33}$$

Функции Ψ и Ψ^* удовлетворяют уравнению (31), следовательно,

$$\Psi^* (\Box \Psi) - (\Box \Psi^*) \Psi = 0$$

и, используя определение оператора Даламбера, имеем

$$\partial_\mu [\Psi^* (\partial^\mu \Psi) - (\partial^\mu \Psi^*) \Psi] = 0.$$

Уравнение непрерывности будет выполнено, если выбрать j^μ, пропорциональным выражению, стоящему в квадратных скобках. Коэффициент пропорциональности выбирается так, чтобы в нерелятивистском пределе получилось обычное определение

$$j^\mu = \frac{i}{2m} [\Psi^* (\partial^\mu \Psi) - (\partial^\mu \Psi^*) \Psi],$$

т. е.

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}, t) &= \frac{i}{2m} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi\right], \\ \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) &= \frac{1}{2im} [\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi]. \end{aligned} \tag{34}$$

Исследуя выражение (34) получаем, что *плотность $P(\boldsymbol{r}, t)$ не является положительно определенной.* В этом заключается основная трудность, связанная с уравнением Клейна — Гордона.

Другая трудность, связанная с предыдущей, относится к «решениям с отрицательной энергией». Если, например, рассматривать плосковолновые решения уравнения без внешнего поля

$$\Psi = \exp [-i(Et - \boldsymbol{pr})],$$

то, подставляя это выражение в (31), получим

$$E = \pm \sqrt{p^2 + m^2}.$$

Следовательно, существуют решения с отрицательной энергией $-\sqrt{p^2 + m^2}$. Их появление, очевидно, вызвано упоминавшимся

выше введением в теорию отрицательных масс (было бы более корректным называть их решениями с отрицательной массой; однако при нулевом внешнем поле различие между массой и энергией иллюзорно). Для преодоления этих трудностей мы, следуя Паули и Вайскопфу [1]), изменим интерпретацию 4-вектора j^μ и определение средних значений. При новой интерпретации теории величина ej^μ отвечает 4-вектору плотности тока, в частности, $eP(\boldsymbol{r}, t)$ есть плотность электрического заряда. Следовательно, уравнение (33) выражает закон сохранения заряда. С другой стороны, число частиц не сохраняется, что вызвано возможностью аннигиляции или рождения пар частиц с противоположными зарядами. Последовательное рассмотрение таких явлений возможно только в теории поля. При выбранной интерпретации мы получаем теорию одного заряда, а не одной частицы. В теории Дирака нам удастся построить положительно определенную плотность P, однако мы увидим, что трудность, связанная с отрицательными энергиями, остается, и теорию Дирака также нельзя считать удовлетворительной одночастичной теорией (раздел VI).

§ 6. Уравнение Дирака

Перейдем к построению релятивистского волнового уравнения для электронов. Следуя Дираку, будем поступать по аналогии с нерелятивистской квантовой механикой.

В нерелятивистской теории электрон описывается двухкомпонентным спинором, который при вращениях преобразуется, как момент импульса, равный $^1/_2$. Поэтому в релятивистской теории электрон должен описываться волновой функцией, которая состоит из нескольких компонент и изменяется определенным образом при преобразованиях Лоренца. Обозначим $\psi_s(\boldsymbol{r}, t)$ компоненту с номером s волновой функции Ψ. Тогда Ψ можно записать в виде матрицы, состоящей из одного столбца:

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_N \end{vmatrix}.$$

Как и в нерелятивистском случае, волновую функцию Ψ в данный момент времени можно рассматривать как функцию пространственных координат $\boldsymbol{r}$ и внутренних, или спиновых, переменных s ($s = 1, 2, \ldots, N$). Такая волновая функция задает

[1]) *W. Pauli, V. Weisskopf.* Helv. Phys. Acta 7, 709 (1934); см. также цитированную в предыдущей сноске статью *H. Feshbach, F. Villars.*

некоторый вектор состояния $|\psi(t)\rangle$, а пространство $\mathscr{E}$ таких состояний есть тензорное произведение

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}^{(0)} \otimes \mathscr{E}^{(s)}$$

пространства $\mathscr{E}^{(0)}$ орбитальных переменных и пространства $\mathscr{E}^{(s)}$ спиновых переменных; волновая функция Ψ отвечает этому вектору в подходящем представлении

$$\Psi(\boldsymbol{r}, s; t) \equiv \psi_s(\boldsymbol{r}, t) \equiv \langle \boldsymbol{r} s | \Psi(t) \rangle.$$

Продолжая аналогию, мы определим плотность вероятности положения частицы формулой

$$P(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{s=1}^{N} |\psi_s|^2. \tag{35}$$

В соответствии с такими гипотезами волновое уравнение должно иметь вид

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_D \Psi, \tag{36}$$

где H_D — эрмитов оператор в пространстве векторов состояния. Действительно, поскольку Ψ полностью определяет динамическое состояние электрона в данный момент времени, волновое уравнение должно быть первого порядка по времени, а для того, чтобы гарантировать самосогласованность нашего определения $P(\boldsymbol{r}, t)$, оператор H_D должен быть эрмитовым (см. § IV. 3).

Поскольку мы ищем релятивистское волновое уравнение, естественно потребовать, чтобы оно обладало формальной симметрией между пространственными координатами и временем, т. е. было уравнением первого порядка и по отношению к пространственным переменным.

Рассмотрим вначале электрон в случае, когда внешнее поле равно нулю. Гамильтониан должен быть инвариантным относительно трансляций и, следовательно, не зависит от $\boldsymbol{r}$. Учитывая все вышесказанное, его можно записать в виде

$$H_D = \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{p} + \beta m, \tag{37}$$

где оператор $\boldsymbol{p}$ получается по правилу соответствия (26), т. е. $\boldsymbol{p} = -i\nabla$, а $\boldsymbol{\alpha} \equiv (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ и β означают 4 эрмитовых оператора, действующих только на спиновые переменные. Если использовать обозначение $E \equiv i\partial/\partial t$, то волновое уравнение можно записать в виде

$$[E - \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{p} - \beta m] \Psi = 0. \tag{38}$$

Для определения $\boldsymbol{\alpha}$ и β мы воспользуемся принципом соответствия и потребуем, чтобы решение этого уравнения удовлетворяло уравнению Клейна — Гордона

$$[E^2 - \boldsymbol{p}^2 - m^2] \Psi = 0. \tag{39}$$

Умножая уравнение (38) слева на оператор $[E + \boldsymbol{\alpha p} + \beta m]$, получаем уравнение второго порядка

$$\Big[E^2 - \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 - \beta^2 m^2 - \sum_{k<l} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k)\, p^k p^l - \\ - \sum_k (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k)\, m p^k\Big] \Psi = 0.$$

Полученное уравнение и уравнение (39) тождественны, если 4 оператора $\boldsymbol{\alpha}$ и β антикоммутируют, а их квадраты равны 1

$$(\alpha^k)^2 = 1, \quad \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = 0 \quad (k \neq l), \\ \beta^2 = 1, \quad \alpha^k \beta + \beta \alpha^k = 0. \tag{40}$$

Уравнение (38), в котором матрицы $\boldsymbol{\alpha}$ и β эрмитовы и удовлетворяют соотношениям (40), называется уравнением Дирака.

Для того чтобы получить уравнение Дирака, описывающее электрон во внешнем электромагнитном поле $(\varphi, \boldsymbol{A})$, нужно сделать подстановку

$$E \to E - e\varphi, \quad \boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A} \tag{41}$$

(e — заряд электрона: $e < 0$). Тогда получим

$$[(E - e\varphi) - \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) - \beta m]\, \Psi = 0, \tag{42}$$

т. е.

$$\Big[\Big(i \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\Big) - \boldsymbol{\alpha}(-i\nabla - e\boldsymbol{A}) - \beta m\Big] \Psi = 0. \tag{43}$$

Сравнивая полученное уравнение с уравнением (36), находим выражение для гамильтониана Дирака при наличии внешнего поля

$$H_D = e\varphi + \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) + \beta m. \tag{44}$$

§ 7. Построение пространства $\mathscr{E}^{(s)}$ Представление Дирака

Нам осталось сконструировать пространство $\mathscr{E}^{(s)}$. Операторами в этом пространстве являются четыре основных оператора: β, α_x, α_y, α_z и различные функции от этих операторов. Пространство $\mathscr{E}^{(s)}$ должно быть неприводимым по отношению к этому набору операторов.

Для построения $\mathscr{E}^{(s)}$ мы используем свойство эрмитовости четырех основных операторов и соотношения (40), которые определяют их алгебраические свойства.

Эти свойства аналогичны свойствам трех операторов σ_1, σ_2, σ_3 нерелятивистской теории спина 1/2. В этом случае размерность пространства $\mathscr{E}^{(\sigma)}$ спиновых переменных равна двум. Оно строилось следующим образом. Так как σ_3 — эрмитов оператор

и $\sigma_3^2 = 1$, то его собственными значениями могут быть только ± 1. Более того, с каждым собственным вектором σ_3 можно связать другой собственный вектор, отвечающий собственному значению противоположного знака. Рассмотрим, например, вектор $|+\rangle$, такой, что $\sigma_3|+\rangle = |+\rangle$. Тогда в силу антикоммутативности σ_3 и σ_1 для вектора $|-\rangle \equiv \sigma_1|+\rangle$ получим $\sigma_3|-\rangle = (-1)|-\rangle$. В результате имеем $\sigma_1|\pm\rangle = |\mp\rangle$ и $\sigma_3|\pm\rangle = (\pm 1)|\pm\rangle$. Следовательно, пространство, натянутое на векторы $|+\rangle$ и $|-\rangle$, инвариантно по отношению к действию операторов σ_3 и σ_1 и по отношению к функциям от этих операторов (а именно $\sigma_2 \equiv i\sigma_1\sigma_3$). Из способа построения пространства видно, что оно неприводимо, следовательно, нами построено искомое пространство $\mathscr{E}^{(\sigma)}$. В представлении, где базисными векторами являются $|+\rangle$ и $|-\rangle$, операторы σ_1, σ_2 и σ_3 задаются матрицами Паули (см. § XIII. 19 или формулу (VII. 65)).

Сведем задачу построения $\mathscr{E}^{(s)}$ к предыдущей. Рассмотрим операторы σ_x, σ_y, σ_z и ρ_1, ρ_2, ρ_3, определяемые равенствами

$$\sigma_z = -i\alpha_x\alpha_y, \quad \sigma_x = -i\alpha_y\alpha_z, \quad \sigma_y = -i\alpha_z\alpha_x, \tag{45}$$

$$\rho_3 = \beta, \quad \rho_1 = \sigma_z\alpha_z = -i\alpha_x\alpha_y\alpha_z, \quad \rho_2 = i\rho_1\rho_3 = -\beta\alpha_x\alpha_y\alpha_z. \tag{46}$$

Четыре основных оператора выражаются через ρ и σ по формулам

$$\beta = \rho_3, \quad \alpha^k = \rho_1\sigma^k. \tag{47}$$

Таким образом, построение $\mathscr{E}^{(s)}$ свелось к построению пространства, неприводимого по отношению к операторам ρ и σ. Легко показать, что:

(i) каждый оператор ρ коммутирует с каждым σ;

(ii) σ — три антикоммутирующих эрмитовых оператора, квадраты которых равны единице;

(iii) ρ — три антикоммутирующих эрмитовых оператора, квадраты которых равны единице.

Следовательно (см. § VIII. 7):

(i) $\mathscr{E}^{(s)}$ есть тензорное произведение

$$\mathscr{E}^{(s)} = \mathscr{E}^{(\rho)} \otimes \mathscr{E}^{(\sigma)}$$

пространства $\mathscr{E}^{(\rho)}$, неприводимого по отношению к ρ, и пространства $\mathscr{E}^{(\sigma)}$, неприводимого по отношению к σ;

(ii) размерность $\mathscr{E}^{(\sigma)}$ равна двум и оно может быть построено приведенным выше способом;

(iii) размерность $\mathscr{E}^{(\rho)}$ также равна двум и оно может быть построено тем же способом.

Таким образом, *размерность пространства $\mathscr{E}^{(s)}$ равна четырем.*

В следующих разделах мы покажем, что операторы σ связаны со спином, а ρ — со знаком энергии, поскольку уравнение

Дирака, так же как и уравнение Клейна — Гордона, имеет решения с отрицательной энергией. В частности, мы увидим, что $\boldsymbol{\alpha}$ есть полярный векторный оператор, а $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — аксиальный векторный оператор. Кроме того, формально имеем

$$\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha} = 2i\boldsymbol{\sigma}. \tag{48}$$

Оператор спина электрона есть $^1/_2\ \boldsymbol{\sigma}$, а знак энергии определяется собственным значением оператора $\beta \equiv \rho_3$.

Динамическое состояние электрона определяется волновой функцией Ψ, имеющей 4 компоненты, что в два раза больше, чем в нерелятивистской теории частицы со спином $^1/_2$. Представление, в котором ρ и σ задаются матрицами Паули (см. ур. (VII.65)—(VII.66)), называется *представлением Дирака*. В этом представлении каждая компонента отвечает определенной ориентации спина по оси Oz и определенному знаку энергии.

§ 8. Ковариантная форма уравнения Дирака

Дирак первоначально получил свое уравнение в форме (43). Такая запись удобна для физической интерпретации и перехода к нерелятивистскому пределу. Получим форму уравнения Дирака, которая симметрична относительно временно́й и пространственных координат и более предпочтительна в тех случаях, когда основную роль играют вопросы релятивистской ковариантности.

Умножим уравнение (43) слева на β, тогда, вводя обозначения

$$\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) \equiv (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}),$$
$$\gamma^0 \equiv \beta, \quad \boldsymbol{\gamma} \equiv \beta\boldsymbol{\alpha}, \tag{49}$$

получим

$$[i\gamma^\mu D_\mu - m]\,\Psi \equiv [\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\,\Psi = 0. \tag{50}$$

Свойства γ^μ легко получить, используя определения (49) и свойства $\boldsymbol{\alpha}$ и β. Десять соотношений (40) переходят в десять соотношений

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \tag{51}$$

Условия эрмитовости $\boldsymbol{\alpha}$ и β эквивалентны условиям

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \quad \gamma^{k\dagger} = -\gamma^k, \tag{52}$$

которые можно записать в компактной форме

$$\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0. \tag{53}$$

Удобно распространить на операторы γ правила подъема и опускания индексов

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu. \tag{54}$$

Отметим, что

$$\gamma_0 = \gamma^0, \quad \gamma_k = -\gamma^k, \tag{55}$$

$$\gamma^\mu = \gamma_\mu^+ = \gamma_\mu^{-1}. \tag{56}$$

§ 9. Сопряженное уравнение. Определение тока

Выше мы построили положительно определенную плотность вероятности (ур. (35)). Как отмечалось, эрмитовость гамильтониана Дирака гарантирует самосогласованность этого определения. Определим плотность тока и покажем, что для решений уравнения Дирака плотность тока удовлетворяет уравнению непрерывности. Вначале рассмотрим этот вопрос, используя форму Дирака, а затем повторим рассуждения с ковариантной формой.

Допустим, что выбрано некоторое представление для β и α, тогда волновая функция Ψ есть матрица-столбец

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Обозначим эрмитово-сопряженную к ней

$$\Psi^+ \equiv (\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*).$$

Операторы в спиновом пространстве являются матрицами 4×4. Можно определить скалярное произведение, в котором суммирование происходит только по спиновым переменным. Обозначим такое скалярное произведение простыми скобками. Тогда плотность P можно записать в виде

$$P(\boldsymbol{r}, t) \equiv (\Psi^+\Psi). \tag{57}$$

В качестве другого примера рассмотрим матричный элемент β_{st} матрицы β, стоящий в строке s и столбце t ($s, t = 1, 2, 3, 4$), тогда имеем

$$(\Psi^+\beta\Psi) \equiv \sum_s \sum_t \psi_s^*\beta_{st}\psi_t.$$

Пусть Ψ — решение уравнения Дирака

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H_D\Psi = \left[e\varphi + \sum_k \alpha^k\left(-i\frac{\partial}{\partial x^k} - eA^k\right) + \beta m\right]\Psi, \tag{58}$$

тогда Ψ^+ есть решение эрмитово-сопряженного уравнения, которое получается комплексным сопряжением уравнения (58) и заменой каждой матрицы в нем на транспонированную:

$$i\frac{\partial\Psi^+}{\partial t} = -\Psi^+ H_D = -e\varphi\Psi^+ - \sum_k \left(i\frac{\partial}{\partial x^k} - eA^k\right)\Psi^+\alpha^k - m\Psi^+\beta. \quad (59)$$

Умножая скалярно уравнение (58) слева на Ψ^+, а уравнение (59) справа на Ψ и складывая, получим

$$i\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = -\,i\sum_k \frac{\partial}{\partial x^k}(\Psi^+\alpha^k\Psi). \quad (60)$$

Слева стоит производная по времени от плотности вероятности P, а справа — дивергенция некоторого вектора $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) \equiv (\Psi^+\boldsymbol{\alpha}\Psi). \quad (61)$$

Полученная величина $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)$ и представляет собой искомую плотность тока, а уравнение (60) есть уравнение непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t}P + \nabla\boldsymbol{j} = 0.$$

Можно повторить приведенные выше рассуждения, используя ковариантную форму уравнения Дирака (ур. (50)). Эрмитово-сопряженным к уравнению (50) будет

$$(-i\partial_\mu - eA_\mu)\Psi^+\gamma^{\mu+} - m\Psi^+ = 0, \quad (62)$$

(где символ $\partial_\mu\Psi^+\gamma^{\mu+}$ обозначает матрицу-строку из четырех элементов $(\partial\Psi^+/\partial x^\mu)\gamma^{\mu+}$). Удобно ввести обозначение

$$\overline{\Psi} = \Psi^+\gamma^0, \quad \Psi^+ = \overline{\Psi}\gamma^0. \quad (63)$$

Умножая уравнение (62) справа на γ^0 и учитывая соотношения (53), получим уравнение

$$(-i\partial_\mu - eA_\mu)\overline{\Psi}\gamma^\mu - m\overline{\Psi} = 0, \quad (64)$$

которое эквивалентно (59). Величина $\overline{\Psi}$ называется *сопряженной* к Ψ, а уравнение (64) — *сопряженным уравнением*.

Умножая скалярно уравнения (50) слева на $\overline{\Psi}$, а (64) — справа на Ψ и вычитая их, имеем

$$i\partial_\mu(\overline{\Psi}\gamma^\mu\Psi) = 0.$$

Определим четырехмерный вектор плотности тока

$$j^\mu \equiv (\overline{\Psi}\gamma^\mu\Psi). \quad (65)$$

Тогда предыдущее уравнение эквивалентно уравнению непрерывности

$$\partial_\mu j^\mu = 0.$$

Легко показать, что $j^\mu \equiv (P, j)$; таким образом, мы записали уравнение непрерывности в ковариантной форме. В следующем разделе мы покажем, что четыре компоненты j^μ действительно образуют 4-вектор.

Раздел III. СВОЙСТВА ИНВАРИАНТНОСТИ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА

§ 10. Свойства матриц Дирака

Прежде чем рассматривать свойства инвариантности уравнения Дирака, изучим свойства 4×4 *матриц* $\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$, которые удовлетворяют соотношениям

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}I, \tag{66}$$

где I — единичная матрица. Матричные соотношения (66) являются аналогами соотношений (51) между операторами, однако рассматриваемые здесь матрицы не обязаны удовлетворять условиям унитарности (53). Все свойства, которые мы получим, будут следовать только из соотношений (66).

Матрицы γ^A. Поскольку матрицы γ^μ антикоммутируют, а квадрат любой из них равен $+I$ или $-I$, то любое произведение нескольких матриц γ^μ равно, с точностью до знака, одной из 16-ти матриц γ^A, приведенных в табл. II. Матрицы γ^A сгруппированы в пять классов (S), (V), (T), (A) и (P), каждый из которых содержит 1, 4, 6, 4 и 1 элементов соответственно (причины такой классификации станут ясны в конце этого раздела (см. § 14)).

Таблица II

Матрицы γ^A

Обозначения	Явный вид	
	$(\gamma^A)^2 = I$	$(\gamma^A)^2 = -I$
(S) $1 \equiv$	I	
(V) $\gamma^\mu \equiv \{\gamma^0, \gamma^k\} \equiv$	γ^0	γ^1 γ^2 γ^3
(T) $\gamma^{[\lambda\mu]} \equiv \{\gamma^k\gamma^0, \gamma^5\gamma^0\gamma^k\} \equiv$	$\gamma^1\gamma^0$ $\gamma^2\gamma^0$ $\gamma^3\gamma^0$	$\gamma^2\gamma^3$ $\gamma^3\gamma^1$ $\gamma^1\gamma^2$
(A) $\gamma^{[\lambda\mu\nu]} \equiv \{\gamma^0\gamma^5, \gamma^k\gamma^5\} \equiv$	$\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	$\gamma^0\gamma^2\gamma^3$ $\gamma^0\gamma^3\gamma^1$ $\gamma^0\gamma^1\gamma^2$
(P) $\gamma^{[\lambda\mu\nu\varrho]} \equiv \gamma^5$		$\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$

Ясно, что квадраты этих матриц $(\gamma^A)^2$ равны $+I$ или $-I$; шесть матриц, квадраты которых равны $+I$, расположены в левом столбце, десять матриц, квадраты которых равны $-I$, расположены в правом столбце.

Из всех этих матриц только единичная матрица I коммутирует со всеми остальными. Если $\gamma^A \neq I$, то она антикоммутирует с 8 из 16 матриц и коммутирует с 8 оставшимися.

В частности, матрица γ^5, которая определяется следующим образом [1]):

$$\gamma^5 \equiv \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \tag{67}$$

антикоммутирует с γ^μ:

$$\gamma^5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^5 = 0, \tag{68}$$

а ее квадрат равен

$$(\gamma^5)^2 = -I. \tag{69}$$

Обратные матрицы (γ_A). Определим матрицы γ_μ соотношением

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu. \tag{70}$$

Очевидно, что

$$\gamma^\mu = [\gamma_\mu]^{-1}.$$

Как следствие, мы получим обратную к матрице γ^A, если в ее выражении через матрицы γ^μ изменим порядок их следствия на обратный и каждую матрицу γ^μ заменим на γ_μ. Обозначим получившееся выражение γ_A

$$\gamma_A\gamma^A = \gamma^A\gamma_A = I. \tag{71}$$

Действуя таким образом, находим обратную матрицу к γ^5

$$\gamma_5 = \gamma_3\gamma_2\gamma_1\gamma_0.$$

След и определитель. Справедливо равенство

$$\operatorname{Tr}\gamma^A = \begin{cases} 4, & \text{если } \gamma^A = I, \\ 0, & \text{если } \gamma^A \neq I. \end{cases} \tag{72}$$

Для доказательства предположим, что $\gamma^A \neq I$ и пусть γ^B одна из 8 матриц, антикоммутирующих с γ^A

$$\gamma^A = -\gamma^B\gamma^A\gamma_B.$$

Тогда имеем

$$\operatorname{Tr}\gamma^A = -\operatorname{Tr}\gamma^B\gamma^A\gamma_B = -\operatorname{Tr}\gamma_B\gamma^B\gamma^A = -\operatorname{Tr}\gamma^A = 0.$$

Отметим также, что (задача 3)

$$\det\gamma^A = 1.$$

---

[1]) Индекс 4 обычно используется для обозначения временно́й компоненты, которая определяется равенством $x^4 = ix^0 = ict$.

Лемма о перестройке. Следующее свойство устанавливается простой проверкой. Если умножить каждую из 16 матриц γ^A справа (или слева) на одну из них, то с точностью до знака и порядка получим те же 16 матриц.

Линейная независимость и неприводимость. Используя лемму о перестройке и свойства следа, можно легко показать, что

1°. Матрицы γ^A линейно независимы.

2°. Любая 4×4 матрица M однозначно представляется в виде линейной комбинации матриц γ^A

$$M=\sum_A m_A\gamma^A, \quad m_A=\frac{1}{4}\operatorname{Tr}\gamma_A M.$$

3°. Всякая матрица, коммутирующая с каждой из матриц γ^μ и, следовательно, с каждой из матриц γ^A, пропорциональна единичной матрице

$$\text{если } [M,\ \gamma^\mu]=0 \quad \text{для любого } \mu, \text{ то } \quad M=\text{const}\times I.$$

Фундаментальная теорема. *Пусть γ^μ и γ'^μ — два набора матриц 4×4, которые удовлетворяют соотношениям* (66). *Тогда существует несингулярная* ($\det S\neq 0$) *матрица S, определенная с точностью до множителя и такая, что*

$$\gamma^\mu=S\gamma'^\mu S^{-1} \qquad (\mu=0,\ 1,\ 2,\ 3). \tag{73}$$

Доказательство теоремы проведем следующим образом. С каждым набором γ^μ и γ'^μ связаны 16 матриц γ^A и γ'^A, определение и свойства которых были приведены выше, так что каждой матрице γ^A соответствует некоторая матрица γ'^A, индекс A принимает 16 различных значений. Возьмем некоторую матрицу F и обозначим S следующую матрицу:

$$S\equiv\sum_A \gamma'^A F\gamma_A,$$

где суммирование ведется по всем возможным значениям индекса A.

Выберем конкретную матрицу γ^B, обратная к ней матрица γ_B, а соответствующая матрица из другого набора γ'^B. В силу леммы о перестройке, имеем

$$\gamma'^B S\gamma_B\equiv\sum_A \gamma'^B\gamma'^A F\gamma_A\gamma_B=\sum_A \gamma^A F\gamma_A\equiv S,$$

следовательно

$$\gamma'^B S=S\gamma^B. \tag{74}$$

Для доказательства соотношений (73) остается показать, что матрица S имеет обратную. Построим матрицу T

$$T \equiv \sum_A \gamma^A G \gamma'_A,$$

где G — произвольная матрица. Рассуждая как и ранее, получаем

$$\gamma^B T = T\gamma'^B.$$

Следовательно,

$$\gamma^B TS = T\gamma'^B S = TS\gamma'^B$$

для любой матрицы γ^B. Поскольку матрица TS коммутирует со всеми γ^B, она пропорциональна единичной матрице: $TS = c \times I$. Постоянная c вычисляется по формуле

$$c = \frac{1}{4} \operatorname{Tr} TS = \frac{1}{4} \sum_A \sum_B \operatorname{Tr} \gamma^A G \gamma'_A \gamma'^B F \gamma_B =$$

$$= \frac{1}{4} \operatorname{Tr} G \left(\sum_A \sum_B \gamma'_A \gamma'^B F \gamma_B \gamma^A \right) = 4 \operatorname{Tr} GS.$$

Матрицу F всегда можно выбрать так, чтобы по крайней мере один из матричных элементов S был отличен от нуля. В противном случае легко показать, что матрицы γ^A не были бы линейно независимы. После этого можно выбрать G так, чтобы

$$\operatorname{Tr} GS \equiv \sum_s \sum_t G_{st} S_{ts} = \frac{1}{4},$$

следовательно $c = 1$ и $TS = I$. Таким образом, матрица S имеет обратную и, умножая равенство (74) на S^{-1} справа, получаем соотношения (73).

Если существует другая матрица S', для которой выполнены те же соотношения, то $S^{-1}S'$ коммутирует со всеми матрицами γ^μ и, следовательно, $S^{-1}S' = c \times I$. Верно и обратное: если для S выполнены соотношения (73), то они выполнены и для любой матрицы, пропорциональной S. Тем самым мы доказали, что несингулярная матрица S существует и определена с точностью до множителя. ■

Если матрицы γ^μ, удовлетворяющие соотношениям (66), унитарны

$$\gamma_\mu \equiv \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 = \gamma^{\mu\dagger}, \tag{75}$$

то унитарны все матрицы γ^A и, следовательно, они эрмитовы или антиэрмитовы в зависимости от того, равен ли квадрат $(\gamma^A)^2$ единичной матрице $+I$ или $-I$.

Следующее утверждение, доказательство которого предоставляем читателю, дополняет фундаментальную теорему:

Если γ^μ *и* γ'^μ *— два набора унитарных матриц* 4×4, *удовлетворяющих соотношениям* (66), *то существует определенная с точностью до фазового множителя унитарная матрица* U, *такая, что* $\gamma'^\mu = U\gamma^\mu U^\dagger$ $(\mu = 0, 1, 2, 3)$.

Комплексное сопряжение, матрица B. В частности, если матрицы γ^μ удовлетворяют соотношениям (66) и унитарны, то 4 комплексно сопряженных матрицы $\gamma^{\mu*}$ тоже унитарны и удовлетворяют тем же соотношениям. В силу предыдущего утверждения матрицы γ^μ и $\gamma^{\mu*}$ связаны унитарным преобразованием. Обозначим B матрицу этого преобразования (B определена с точностью до фазового множителя)

$$\gamma^\mu = B\gamma^{\mu*}B^\dagger, \quad \gamma^{\mu*} = B^*\gamma^\mu\tilde{B}. \tag{76}$$

Можно показать, что B антисимметрична

$$B = -\tilde{B},$$

или, что то же самое, справедливы равенства

$$BB^* = B^*B = -I. \tag{77}$$

Если для матриц γ выбрано представление Дирака, то

$$B \equiv B_D = \gamma^2\gamma^5 = -i\rho_3\sigma_y.$$

В этом случае легко проверить справедливость равенств (77).

§ 11. Инвариантность уравнения Дирака при ортохронных преобразованиях системы координат

Принцип относительности требует, чтобы уравнение Дирака и уравнение непрерывности сохраняли одну и ту же форму в различных системах координат, связанных преобразованием Лоренца. В действительности, строго говоря, требуется инвариантность только по отношению к собственным преобразованиям Лоренца [1]), однако теория инвариантна по отношению к полной группе. Рассмотрим вначале подробно инвариантность по отношению к ортохронной группе. Обращение времени, а также другие свойства инвариантности уравнения Дирака, не

[1]) А также по отношению к пространственным и временны́м трансляциям. Эту инвариантность легко установить, используя рассуждения, которые аналогичны приводимым ниже. Если начало координат сдвигается на 4-вектор a^μ, т. е. $x'^\mu x = x^\mu + a^\mu$, то $A'_\mu(x') = A_\mu(x)$ и закон преобразования волновых функций (аналог закона (85)) имеет простой вид

$$\Psi'(x') = \Psi(x).$$

связанные непосредственно с преобразованиями Лоренца, будут рассмотрены в конце этого раздела.

Будем считать, что динамическое состояние электрона в системе координат (R) задается четырехкомпонентной волновой функцией, удовлетворяющей уравнению Дирака

$$[\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu(x)) - m]\Psi(x) = 0. \tag{78}$$

Фиксируем некоторое представление для операторов в пространстве $\mathscr{E}^{(s)}$; символы γ^μ означают тогда вполне определенные матрицы, и соотношение (78) сводится к системе из четырех уравнений $(s = 1, 2, 3, 4)$

$$\sum_{t=1,\,2,\,3,\,4}\ \sum_{\mu} (\gamma^\mu)_{st}\left(i\frac{\partial}{\partial x^\mu} - eA_\mu(x^0x^1x^2x^3)\right)\psi_t(x^0x^1x^2x^3) - \\ - m\psi_s(x^0x^1x^2x^3) = 0$$

для четырех компонент $\psi_s(x)$ волновой функции.

Рассмотрим ту же физическую систему в новой системе координат (R'), связанной с исходной ортохронным преобразованием Лоренца $\mathscr{L}$

$$(R') = \mathscr{L}(R).$$

Преобразование $\mathscr{L}$ характеризуется некоторой матрицей Ω^μ_ν, удовлетворяющей соотношениям (12), (13) и определяющей линейное соответствие между координатами x^μ данной точки в системе (R) и координатами x'^μ *той же точки* в системе (R'), т. е. закон преобразования контравариантных векторов (ур. (11) и (15)). Символически можно записать

$$x' = \mathscr{L}x, \quad x = \mathscr{L}^{-1}x'. \tag{79}$$

Операторы частных производных преобразуются, как ковариантные векторы

$$\partial_\mu = \partial'_\nu \Omega^\nu_\mu. \tag{80}$$

Если обозначить $A'_\mu(x')$ ковариантные компоненты электромагнитного потенциала в новой системе координат, то они связаны с $A_\mu(x)$ по закону преобразования ковариантных векторов

$$A_\mu(x) \equiv A_\mu(\mathscr{L}^{-1}x') = A'_\nu(x')\Omega^\nu_\mu. \tag{81}$$

Как функция новых координат $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению, которое получается из (78) после подстановки (80) и (81)

$$[\hat{\gamma}^\mu(i\partial'_\mu - eA'_\mu(x')) - m]\Psi(\mathscr{L}^{-1}x') = 0, \tag{82}$$

где

$$\hat{\gamma}^\mu \equiv \Omega^\mu_\rho \gamma^\rho. \tag{83}$$

Матрицы γ^μ унитарны и удовлетворяют соотношениям (66). Четыре матрицы $\hat{\gamma}^\mu$ не обязательно унитарны, но в силу ортогональности Ω^μ_ν (соотношения (13)), они также удовлетворяют соотношениям (66), т. е.

$$\hat{\gamma}^\mu\hat{\gamma}^\nu + \hat{\gamma}^\nu\hat{\gamma}^\mu = \Omega^\mu_\rho\Omega^\nu_\sigma(\gamma^\rho\gamma^\sigma + \gamma^\sigma\gamma^\rho) = 2\Omega^\mu_\rho g^{\rho\sigma}\Omega^\nu_\sigma = 2g^{\mu\nu}.$$

В силу фундаментальной теоремы § 10 существует несингулярная матрица Λ, которая преобразует матрицы $\hat{\gamma}$ в γ

$$\hat{\gamma}^\mu \equiv \Omega^\mu_\rho\gamma^\rho = \Lambda^{-1}\gamma^\mu\Lambda \quad (\mu = 0, 1, 2, 3). \tag{84}$$

Подставляя это соотношение в уравнение (82), вводя обозначение

$$\Psi'(x') = \Lambda\Psi(x) \equiv \Lambda\Psi(\mathscr{L}^{-1}x'), \tag{85}$$

и умножая слева на Λ, получаем

$$[\gamma^\mu(i\partial'_\mu - eA'_\mu(x')) - m]\Psi'(x') = 0.$$

Это волновое уравнение описывает эволюцию системы в новой системе координат, оно формально тождественно с (78). Таким образом, уравнение Дирака формально инвариантно относительно ортохронных преобразований системы координат, и закон преобразования волновой функции определяется уравнением (85).

В общем случае матрицу Λ, которая определена с точностью до постоянного множителя, нельзя выбрать унитарной. Однако мы покажем, что множитель всегда можно выбрать таким образом, чтобы

$$\Lambda^\dagger = \gamma^0\Lambda^{-1}\gamma^0, \tag{86}$$

и произвол остается только в фазе.

Поскольку Ω^μ_ρ вещественны, а γ^μ унитарны и удовлетворяют соотношениям (75), то, сравнивая (83) и эрмитово-сопряженное соотношение, находим

$$\hat{\gamma}^{\mu\dagger} = \gamma^0\hat{\gamma}^\mu\gamma^0.$$

Переходя от соотношения (84) к эрмитово-сопряженному и подставляя предыдущую формулу, получаем

$$\hat{\gamma}^\mu = (\gamma^0\Lambda^\dagger\gamma^0)\gamma^\mu(\gamma^0\Lambda^\dagger\gamma^0)^{-1}.$$

Сравнивая эту формулу с (84), видим, что матрица $\Lambda\gamma^0\Lambda^\dagger\gamma^0$ коммутирует с четырьмя матрицами γ^μ и, следовательно, пропорциональна единичной

$$\Lambda^\dagger = c\gamma^0\Lambda^{-1}\gamma^0. \tag{87}$$

Покажем, что постоянная c обязательно вещественна и положительна. Используя формулы (87) и (84), имеем

$$\Lambda^{+}\Lambda = c\gamma^{0}(\Lambda^{-1}\gamma^{0}\Lambda) = c\left(\Omega_{0}^{0} + \sum_{k}\Omega_{k}^{0}\gamma^{0}\gamma^{k}\right),$$

откуда, принимая во внимание (72), получаем: $\operatorname{Tr}\Lambda^{+}\Lambda = 4c\Omega_{0}^{0}$. Поскольку след эрмитовой матрицы $\Lambda^{+}\Lambda$ вещественный и положительный и число Ω_{0}^{0} также вещественно и положительно, то приходим к искомому утверждению о постоянной c. Если матрицу Λ разделить на $\sqrt{c}$, то новая матрица также будет Λ-матрицей и будет удовлетворять уравнению (86). ■

Закон преобразования волновых функций (85) определяет закон преобразования сопряженных функций

$$\overline{\Psi}' \equiv \Psi'^{+}\gamma^{0} = \Psi^{+}\Lambda^{+}\gamma^{0} = \overline{\Psi}\gamma^{0}\Lambda^{+}\gamma^{0},$$

откуда, с учетом (86), получаем

$$\overline{\Psi}'(x') = \overline{\Psi}(x)\,\Lambda^{-1}. \tag{88}$$

Используя этот закон преобразования, читатель без труда проверит, что сопряженное уравнение (64) также формально инвариантно относительно ортохронных преобразований системы координат.

Остается показать инвариантность уравнения непрерывности или что ток j^{μ} (определение (65)) преобразуется как контравариантный 4-вектор [1]).

Последнее легко установить, используя (85), (88) и (84)

$$j'^{\mu}(x') \equiv (\overline{\Psi}'\gamma^{\mu}\Psi') = (\overline{\Psi}\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda\Psi) = \Omega_{\nu}^{\mu}(\overline{\Psi}\gamma^{\nu}\Psi) = \Omega_{\nu}^{\mu}j^{\nu}(x).$$

Условия (84) и (86) для каждого преобразования Лоренца определяют Λ с точностью до фазового множителя. *В данном случае эта фаза не имеет физического смысла.*

Удобно устранить, насколько это возможно, произвол в фазе, потребовав, чтобы Λ образовывали группу, гомоморфную ортохронной группе Лоренца (см. обсуждение в § XV. 8).

Условие (84), с учетом вещественности Ω_{ν}^{μ}, дает

$$\Omega_{\nu}^{\mu}\gamma^{\nu^{*}} = (\Lambda^{*})^{-1}\gamma^{\mu^{*}}\Lambda^{*},$$

откуда, вводя унитарную матрицу B (определение (76)), получаем

$$\Omega_{\nu}^{\mu}\gamma^{\nu} = (B\Lambda^{*}B^{+})^{-1}\gamma^{\mu}(B\Lambda^{*}B^{+}).$$

[1]) В противном случае нормировка волновой функции зависела бы от системы координат и нельзя было бы интерпретировать j^{0} как плотность вероятности положения.

Сравнивая это уравнение и уравнение (84), видим, что $B\Lambda^*B^\dagger\Lambda^{-1}$ коммутирует с четырьмя матрицами γ^μ и, следовательно, пропорциональна единичной матрице. Легко показать, вычисляя, например, $\det B\Lambda^*B^\dagger\Lambda^{-1}$, что модуль коэффициента пропорциональности равен единице; другими словами

$$\Lambda^* = e^{i\lambda}B^\dagger\Lambda B.$$

Так как Λ определена с точностью до фазового множителя, его всегда можно выбрать так, что в полученной формуле будет $e^{i\lambda} = 1$. В дальнейшем будем считать, что сделан именно такой выбор, тогда Λ определена с точностью до знака.

Таким образом, каждому ортохронному преобразованию Лоренца отвечают *две* матрицы Λ, отличающиеся знаком и определяемые тремя условиями:

$$\Omega^\mu_\nu\gamma^\nu = \Lambda^{-1}\gamma^\mu\Lambda, \tag{89а}$$

$$\Lambda^\dagger = \gamma^0\Lambda^{-1}\gamma^0, \tag{89б}$$

$$\Lambda^* = B^\dagger\Lambda B. \tag{89в}$$

Набор матриц Λ, удовлетворяющих этим условиям, образует группу, которая гомоморфна ортохронной группе Лоренца. В следующем параграфе мы увидим, что произвол в знаке Λ нельзя устранить, не нарушив при этом групповой структуры [1]).

§ 12. Преобразования собственной группы

Найдем явные выражения для матриц Λ, которые удовлетворяют условиям (89). В этом параграфе мы будем рассматривать только преобразования собственной группы.

Вначале рассмотрим инфинитезимальные преобразования. Каждому из шести инфинитезимальных «вращений» $g_{\mu\nu} - \varepsilon Z^{(\alpha\beta)}_{\mu\nu}$ соответствует матрица $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)$, которая отличается от единич-

[1]) Вместо условия (89в) можно использовать более общее условия: $\Lambda^* = \eta B^\dagger\Lambda B$, где постоянная η зависит от рассматриваемого преобразования Лоренца. Множество матриц Λ будет иметь структуру группы, если величины η образуют абелево представление группы Лоренца. Следовательно, для преобразований из собственной группы Лоренца $\mathscr{L}_0$ обязательно имеем $\eta = 1$, что снова дает условие (89в). Для преобразований, включающих отражение, т. е. принадлежащих $s\mathscr{L}_0$, имеются две возможности выбора η:

(а) $\eta = 1$ для любого $s\mathscr{L}_0$, что дает (89в);

(б) $\eta = -1$ для любого $s\mathscr{L}_0$, т. е. $\Lambda^* = -B^\dagger\Lambda B$.

Физическое содержание теории, очевидно, не зависит от этого выбора. Обе группы $G^{(а)}$ и $G^{(б)}$, которые соответствуют возможностям (а) и (б), гомоморфны ортохронной группе Лоренца, но не изоморфны друг другу. В частности квадрат матриц, соответствующих отражению s, равен $+I$ в $G^{(а)}$ и $-I$ в $G^{(б)}$ (см. следующую сноску).

ной матрицы на бесконечно малую величину и может быть записана в виде

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon) \approx I + i\varepsilon S_{\alpha\beta}, \tag{90}$$

где $S_{\alpha\beta}$ — конечная матрица, подлежащая определению. Имеем

$$[\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)]^{-1} \approx \Lambda^{(\alpha\beta)}(-\varepsilon) \approx I - i\varepsilon S_{\alpha\beta}.$$

Из условия (89а) получаем

$$-\varepsilon g^{\mu\nu} Z^{(\alpha\beta)}_{\nu\rho} \gamma^{\rho} = -i\varepsilon [S_{\alpha\beta}, \gamma^{\mu}]$$

или, используя (17),

$$[S_{\alpha\beta}, \gamma^{\mu}] = i\left(\delta^{\mu}_{\beta}\gamma_{\alpha} - \delta^{\mu}_{\alpha}\gamma_{\beta}\right).$$

Матрица $S_{\alpha\beta}$ удовлетворяет тем же коммутационным соотношениям с γ^{μ}, что и матрица $\frac{1}{2} i\gamma_{\alpha}\gamma_{\beta}$. Их разность коммутирует с матрицами γ^{μ} и, следовательно, пропорциональна единичной матрице. Легко показать, что условия (89б) и (89в) будут выполнены тогда и только тогда, когда коэффициент пропорциональности равен нулю. Удобно ввести обозначение

$$\sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{1}{2} i [\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}] \equiv i\gamma_{\mu}\gamma_{\nu} \qquad (\mu \neq \nu). \tag{91}$$

Окончательно имеем

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sigma_{\alpha\beta}. \tag{92}$$

Обозначения $S_{\alpha\beta}$ и $\sigma_{\alpha\beta}$ будут также использоваться для операторов, которые задаются матрицами $S_{\alpha\beta}$ и $\sigma_{\alpha\beta}$ соответственно. В дальнейшем мы увидим, что $S_{\alpha\beta}$ есть антисимметричный тензорный оператор (6 компонент), который отвечает внутреннему моменту импульса или спину частицы. Точнее говоря, спин — это пространственная часть (3 компоненты) оператора $S_{\alpha\beta}$, который связан с операторами $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\alpha}$ из § 6 и § 7 соотношениями

$$S_{10} = \frac{1}{2} i\alpha_x, \quad S_{20} = \frac{1}{2} i\alpha_y, \quad S_{30} = \frac{1}{2} i\alpha_z, \tag{93а}$$

$$S_{23} = \frac{1}{2} \sigma_x, \quad S_{31} = \frac{1}{2} \sigma_y, \quad S_{12} = \frac{1}{2} \sigma_z. \tag{93б}$$

Любое конечное преобразование собственной группы Лоренца можно представить в виде произведения последовательных инфинитезимальных преобразований. Следовательно, мы можем построить матрицы Λ, отвечающие конечному изменению системы координат, беря произведения определенных выше

матриц, отвечающих инфинитезимальным преобразованиям. В этом случае условия (89б) и (89в) выполняются автоматически и мы получаем одну из двух возможных матриц Λ.

В частности, «вращение» на угол φ в плоскости $x^\alpha x^\beta$ есть произведение матриц инфинитезимальных вращений в этой плоскости, и матрица $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varphi)$, задающая преобразование, имеет вид

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varphi) = e^{i\varphi S_{\alpha\beta}}. \tag{94}$$

Таким образом (см. сноску на стр. 367), если задано чисто лоренцево преобразование со скоростью $v = \operatorname{th}\varphi$, направленной вдоль оси x, то, принимая во внимание соотношения (93а) и свойства α_x, находим

$$\Lambda^{(xt)}(\varphi) = e^{-\frac{1}{2}\alpha_x\varphi} = \operatorname{ch}\frac{1}{2}\varphi - \alpha_x \operatorname{sh}\frac{1}{2}\varphi. \tag{95}$$

В более общем случае, если $\Lambda_{sp}(\boldsymbol{v})$ — матрица, отвечающая чисто лоренцеву (специальному) преобразованию со скоростью $\boldsymbol{v}$, то имеем

$$\Lambda_{sp}(\boldsymbol{v}) = \operatorname{ch}\frac{1}{2}\varphi - (\boldsymbol{\alpha u})\operatorname{sh}\frac{1}{2}\varphi,$$

где $\boldsymbol{u} \equiv \boldsymbol{v}/v$, $\varphi = \operatorname{arcth} v$.

Введем обозначение

$$b \equiv \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} = \operatorname{ch}\varphi. \tag{96}$$

Предыдущее выражение после элементарных вычислений можно привести к виду

$$\Lambda_{sp}(\boldsymbol{v}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+b)}}[1 + b - (\boldsymbol{\alpha v})\, b]. \tag{97}$$

Рассмотрим теперь вращения в обычном смысле этого слова. Для вращений вокруг оси Oz выражение (94) дает

$$\Lambda^{(xy)}(\varphi) = e^{iS_{12}\varphi} = e^{\frac{1}{2}i\sigma_z\varphi} = \cos\frac{1}{2}\varphi + i\sigma_z \sin\frac{1}{2}\varphi. \tag{98}$$

В более общем случае, если $\Lambda_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ — матрица, отвечающая вращению на угол φ вокруг оси, направленной вдоль единичного вектора $\boldsymbol{u}$, то имеем

$$\Lambda_{\boldsymbol{u}}(\varphi) = \cos\frac{1}{2}\varphi + i\sigma_u \sin\frac{1}{2}\varphi, \tag{99}$$

где $\sigma_u \equiv (\boldsymbol{\sigma u})$.

Теперь мы можем обсудить вопрос о спине частицы, которая описывается уравнением Дирака. Спин определяется трансфор-

мационными свойствами внутренних переменных по отношению к пространственным вращениям. Формула (99) дает общее выражение для матриц преобразования внутренних переменных при вращении. Это выражение отличается от выражения (XIII. 84) только знаком перед σ_u, и одно переходит в другое при замене φ на $-\varphi$. Следовательно, эти матрицы обратны одна к другой. Различие вызвано тем, что в главе XIII мы рассматривали изменение переменных и состояний при вращениях, оставляя оси фиксированными, а здесь мы придерживаемся противоположной точки зрения. Итак, мы видим, что волновая функция, удовлетворяющая уравнению Дирака, преобразуется при вращениях как волновая функция *частицы со спином* 1/2.

Отметим, в частности, что повороту на угол 2π вокруг любой оси не соответствует единичная матрица. Действительно, имеем

$$\Lambda_u(2n\pi) = (-1)^n I; \tag{100}$$

такое свойство матрицы преобразования характеризует полуцелый спин. Ясно, что произвол в знаке матриц Λ нельзя устранить без того, чтобы не нарушить их групповой структуры.

В дальнейшем будем называть волновые функции теории Дирака *спинорами.*

§ 13. Пространственное отражение и ортохронная группа

Коль скоро мы знаем, как меняются спиноры при собственных преобразованиях системы координат, то для определения закона изменения при ортохронных преобразованиях достаточно найти закон их преобразования при отражении s.

Матрицу, соответствующую отражению s, обозначим Λ_s. Соотношение (85) в этом случае принимает вид

$$\Psi'(t, \boldsymbol{r}) = \Lambda_s \Psi(t, -\boldsymbol{r}). \tag{101}$$

Условие (89а) дает

$$\Lambda_s^{-1}\gamma^0\Lambda_s = \gamma^0, \quad \Lambda_s^{-1}\gamma^k\Lambda_s = -\gamma^k,$$

откуда $\Lambda_s = c_s\gamma^0$. Постоянная c_s определяется из условий (89б) и (89в): $c_s = \pm 1$. Следовательно,

$$\Lambda_s = \pm\gamma^0 \tag{102}$$

и в согласии со сказанным выше [1]) Λ_s определена с точностью до знака.

---

[1]) Выражение (102) соответствует выбору (а) (см. предыдущую сноску). Выбор (б) ведет к $\Lambda_s = \pm i\gamma^0$.

§ 14. Построение ковариантных величин

Из компонент спинора $\Psi(x)$ и сопряженного спинора $\bar{\Psi}(x)$ можно построить 16 линейно независимых функций, билинейных по Ψ и $\bar{\Psi}$ и зависящих от x^0, x^1, x^2, x^3. Эти функции можно разбить на пять классов в соответствии с их тензорными свойствами: скаляр S, вектор V^μ, антисимметричный тензор с двумя индексами $T^{[\mu\nu]}$, антисимметричный тензор с тремя индексами $A^{[\lambda\mu\nu]}$ и антисимметричный тензор с четырьмя индексами или псевдоскаляр P. Выражения для перечисленных функций приведены в табл. III.

Таблица III

Тензоры, билинейные по Ψ и $\bar{\Psi}$

Обозначения	Число компонент	Тип
$S(x) \equiv (\bar{\Psi}\Psi)$	1	скаляр
$V^\mu(x) \equiv (\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi)$	4	вектор
$T^{[\mu\nu]}(x) \equiv (\bar{\Psi}\gamma^\mu\gamma^\nu\Psi)$ $(\mu \neq \nu)$	6	тензор 2-значковый
$A^{[\lambda\mu\nu]}(x) \equiv (\bar{\Psi}\gamma^\lambda\gamma^\mu\gamma^\nu\Psi)$ $(\lambda \neq \mu,\ \mu \neq \nu,\ \nu \neq \lambda)$	4	псевдовектор
$P(x) \equiv (\bar{\Psi}\gamma^5\Psi)$	1	псевдоскаляр

Указанные тензорные свойства можно легко доказать, используя закон преобразования спиноров Ψ и $\bar{\Psi}$ (ур. (85) и (86)) и соотношение (89а) между матрицами Λ и коэффициентами Ω^μ_ν соответствующего преобразования Лоренца.

Напомним, что закон преобразования псевдоскаляров отличается от закона преобразования скалярных величин только дополнительным множителем $\det|\Omega^\mu_\nu|$

$$P(x') = \det|\Omega^\mu_\nu|\, P(x).$$

Таким образом, при собственных лоренцевых преобразованиях псевдоскалярные и скалярные величины преобразуются одинаково, а при отражении s псевдоскаляры меняют знак. Точно так же закон преобразования псевдовекторов отличается от закона преобразования векторов дополнительным множителем $\det|\Omega^\mu_\nu|$.

Вектор $V^\mu(x)$ уже интерпретировался нами как четырехмерный вектор плотности тока

$$V^\mu(x) \equiv j^\mu(x).$$

Можно дать соответствующую интерпретацию и остальным величинам. Так, тензор $T^{[\mu\nu]}$ равен, с точностью до постоянного множителя, тензору $S^{\mu\nu}$, который можно интерпретировать как плотность спина

$$T^{[\mu\nu]} = -2iS^{\mu\nu}(x) \equiv -2i(\bar{\Psi}S^{\mu\nu}\Psi).$$

§ 15. Другая формулировка свойств инвариантности: преобразование состояний

В предыдущих параграфах мы рассматривали преобразование как операцию, которая выполняется над системой координат, оставляя физическую систему неизменной. Можно изменить точку зрения и преобразовать физическую систему, оставляя неизменной систему координат. Именно так мы поступали в третьей части (см., в частности, замечания § XIII. 11). Хотя вытекающие результаты формулируются различным образом, обе точки зрения эквивалентны.

Поясним указанную эквивалентность. Пусть (S) — состояние физической системы, которое в системе координат (R) задается спинором $\Psi(x)$. Пусть (S') есть состояние, которое получается из (S) при преобразовании $\mathscr{L}$, а $(\hat{R})$ есть система координат, которая переходит в (R) при том же преобразовании (см. рис. 21)

$$(S') = \mathscr{L}(S), \quad (\hat{R}) = \mathscr{L}^{-1}(R).$$

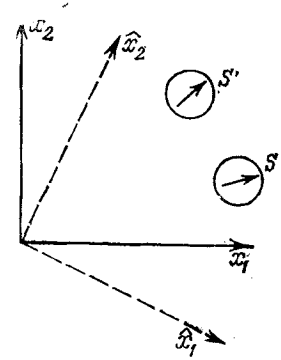


Рис. 21. Два способа рассмотрения преобразования Лоренца: изменение системы отсчета ($x \to \xi$) и преобразование системы ($S \to S'$).

Рассмотрим три следующих спинора:

$\Psi(x)$, представляющий (S) в системе (R),

$\hat{\Psi}(\xi)$, » (S) » $(\hat{R})$,

$\Psi'(x)$, » (S') » (R).

Ясно, что $\hat{\Psi}$ и Ψ' равны при совпадающих значениях аргументов

$$\Psi'(x) = \hat{\Psi}(x). \tag{103}$$

Соответствие между $\hat{\Psi}$ и Ψ было установлено в § 11. Поскольку преобразование $\mathscr{L}$ переводит систему $(\hat{R})$ в (R), то, используя (85) и вводя связанную с $\mathscr{L}$ матрицу Λ, имеем

$$\Psi(\xi) = \Lambda\hat{\Psi}(\mathscr{L}^{-1}\xi).$$

Следовательно,

$$\Psi'(x) = \Lambda^{-1}\Psi(\mathscr{L}x). \tag{104}$$

Сравнивая с уравнением (85), видим, что в преобразовании состояний участвует оператор, обратный к оператору, отвечающему изменению системы координат.

Эти замечания относятся также и к электромагнитному полю, в котором движется дираковская частица. Обозначим поле (A) и пусть (A') — поле, которое получается при преобразовании $\mathscr{L}$:

$$(A') = \mathscr{L}(A).$$

Рассмотрим следующие три (ковариантные) 4-вектора:

$A_\mu(x)$, представляющий (A) в системе (R),

$\hat{A}_\mu(\hat{x})$, » (A) » $(\hat{R})$,

$A'_\mu(x)$, » (A') » (R).

Мы можем повторить приведенные выше рассуждения для спиноров, тогда получим

$$A'_\mu(x) = \hat{A}_\mu(x). \tag{105}$$

Согласно уравнению (81) имеем

$$\hat{A}_\mu(\mathscr{L}^{-1}x) = A_\nu(x)\,\Omega^\nu_\mu,$$

следовательно,

$$A'_\mu(x) = A_\nu(\mathscr{L}x)\,\Omega^\nu_\mu. \tag{106}$$

Допустим теперь, что $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению Дирака с потенциалом $A_\mu(x)$:

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\Psi = 0. \tag{107}$$

Принимая во внимание равенства (103) и (105), из инвариантности уравнения Дирака при изменении системы координат $(R)\to(\hat{R})$ получаем

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA'_\mu) - m]\Psi' = 0. \tag{108}$$

Таким образом, свойство инвариантности формы уравнения можно сформулировать так:

Если $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению Дирака с потенциалом $A_\mu(x)$, то состояние $\Psi'(x)$, которое получается при преобразовании $\mathscr{L}$, также удовлетворяет уравнению Дирака с преобразованным потенциалом $A'_\mu(x)$.

§ 16. Условие инвариантности уравнения движения

Уравнения (107) и (108) в общем случае различны. Они совпадают, только если внешний потенциал (A) инвариантен относительно преобразования $\mathscr{L}$, т. е. если

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x).$$

В этом случае спиноры Ψ и Ψ' удовлетворяют *одному и тому же* волновому уравнению. Следовательно, *уравнение для динамических состояний инвариантно относительно любых преобразований* $\mathscr{L}$, *которые не меняют внешний потенциал.*

До сих пор в качестве $\mathscr{L}$ мы рассматривали ортохронные преобразования Лоренца. Однако все сказанное выше можно повторить для пространственно-временных *трансляций* (см. сноску на стр. 384). Установленные свойства инвариантности сохраняются и в этом случае.

§ 17. Операторы преобразования. Импульс, момент импульса, четность

Для того чтобы продолжить этот анализ в соответствии с общей схемой, которая была развита в главе XV, мы запишем закон преобразования (104) в виде

$$\Psi' = T\Psi, \tag{109}$$

где T — соответствующий линейный оператор. Инвариантность уравнения Дирака при преобразованиях можно тогда выразить как соотношение между операторами

$$T\mathscr{D}(A)T^{-1} = \mathscr{D}(A'), \tag{110}$$

где $\mathscr{D}(A)$ и $\mathscr{D}(A')$ — операторы Дирака с потенциалами A и A'

$$\mathscr{D}(A) \equiv \gamma^{\mu}(i\partial_{\mu} - eA_{\mu}). \tag{111}$$

Условие того, что уравнение движения не меняется при преобразовании $\mathscr{L}$, можно записать как соотношение коммутации

$$[T, \mathscr{D}(A)] = 0. \tag{112}$$

Оператор T легко построить. Он является произведением операторов $T^{(s)}$, действующего только на спиновые переменные, и $T^{(0)}$, действующего только на орбитальные переменные,

$$T = T^{(s)} \otimes T^{(0)}.$$

Сравнивая формулы (109) и (104), видим, что

$$T^{(s)} = \Lambda^{-1}, \tag{113}$$

где Λ обозначает *оператор*, который представляется определенной в § 11 матрицей Λ.

Найдем явный вид T для инфинитезимальных трансляций и лоренцевых «поворотов» и для отражения s.

В случае трансляций $T^{(s)} = 1$. Введем дифференциальный оператор

$$p_{\mu} \equiv i\partial_{\mu}, \tag{114}$$

который представляет собой *четырехмерный вектор энергии-импульса* (более точно — ковариантные компоненты этого 4-вектора). Для бесконечно малого сдвига на ε вдоль оси x^α находим

$$T = 1 - i\varepsilon p_\alpha.$$

Рассмотрим «инфинитезимальный поворот» на угол ε в плоскости $x^\alpha x^\beta$. В этом случае имеем

$$(\mathscr{L}x)^\mu = x^\mu - \varepsilon Z_\nu^{(\alpha\beta)\mu} x^\nu = x^\mu - \varepsilon\left(\delta_\alpha^\mu x_\beta - \delta_\beta^\mu x_\alpha\right).$$

Если $\psi_s(x)$ — некоторая компонента спинора $\Psi(x)$, то в первом порядке по ε

$$\psi_s(\mathscr{L}x) \approx \psi_s(x) + \varepsilon\left(x_\alpha \frac{\partial \psi_s}{\partial x^\beta} - x_\beta \frac{\partial \psi_s}{\partial x^\alpha}\right).$$

Введя дифференциальный оператор

$$L_{\alpha\beta} \equiv x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha, \tag{115}$$

перепишем предыдущее соотношение в виде

$$\psi_s(\mathscr{L}x) \approx (1 - i\varepsilon L_{\alpha\beta})\,\psi_s(x).$$

С другой стороны, на основании формул (90) и (113) имеем

$$T^{(s)} \approx (1 - i\varepsilon S_{\alpha\beta}),$$

где $S_{\alpha\beta}$ — оператор, определяемый равенством (92). Окончательно формула (109), которая выражает закон преобразования спиноров, для случая «инфинитезимального поворота» принимает вид

$$\Psi'(x) \approx (1 - i\varepsilon S_{\alpha\beta})(1 - i\varepsilon L_{\alpha\beta})\,\Psi(x) \approx (1 - i\varepsilon J_{\alpha\beta})\,\Psi(x),$$

где

$$J_{\alpha\beta} \equiv L_{\alpha\beta} + S_{\alpha\beta} \equiv x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha + \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}. \tag{116}$$

Три пространственных компоненты J_{23}, J_{31} и J_{12} оператора $J_{\alpha\beta}$ связаны с инфинитезимальными вращениями вокруг осей Ox, Oy и Oz соответственно. Они являются компонентами полного момента импульса $\boldsymbol{J}$ и справедливы равенства

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}, \quad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}. \tag{117}$$

Компоненты $\boldsymbol{L}$ действуют только на орбитальные переменные: $\boldsymbol{L}$ — оператор орбитального момента импульса. Компоненты $\boldsymbol{S}$ действуют только на внутренние переменные: $\boldsymbol{S}$ — оператор спина частицы.

Легко показать, что $\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{S}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям, характеризующим момент импульса, и $\boldsymbol{S}^2 = 3/4$, откуда следует, что спин частицы равен 1/2.

Оператор, связанный с пространственным отражением, называется оператором четности и обозначается P. Пусть $P^{(0)}$ обозначает оператор «орбитальной четности»:

$$P^{(0)}\Psi(t, \boldsymbol{r}) = \Psi(t, -\boldsymbol{r}).$$

В силу равенства (113) и результатов § 13 (см. равенство (102)), мы можем выбрать для P два выражения, отличающиеся знаком. Выберем наиболее часто употребляемое

$$P = \gamma^0 P^{(0)}. \tag{118}$$

Отметим, что оператор P эрмитов и $P^2 = 1$.

§ 18. Законы сохранения и интегралы движения

Если преобразование зависит от времени, то связанный с ним оператор T изменяет зависимость Ψ от времени. Так происходит в случае временных трансляций и специальных преобразований Лоренца.

С другой стороны, *если преобразование не зависит от времени, то действие T определяется независимо от уравнения движения состояний, на которые он действует.* Тогда оператор T можно определить как оператор преобразования векторов состояния и наблюдаемых системы, как это было сделано в главе XV (раздел II). Свойства инвариантности уравнения, которое определяет зависимость состояний от времени, можно сформулировать при этом в виде законов сохранения.

Например, если $\mathscr{L}$ есть преобразование только пространственных переменных, то оператор T является некоторой функцией операторов инфинитезимальных трансляций, инфинитезимальных вращений и отражения, т. е. функцией $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{J}$ и P. Следовательно, T коммутирует с γ^0 и, поскольку

$$\gamma^0\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_D\right) \equiv \mathscr{D}(A) - m,$$

коммутационное соотношение (112) в этом случае эквивалентно

$$[T, H_D] = 0.$$

Мы получили то же условие, что и в § XV. 12 и все сказанное там о связи между свойствами инвариантности гамильтониана и законами сохранения справедливо и в этом случае.

Так, если потенциал $A_\mu(x)$ инвариантен относительно трансляций, то справедливы коммутационные соотношения

$$[\boldsymbol{p}, H_D] = 0,$$

и сохраняется импульс. Если потенциал $A_\mu(x)$ сферически-симметричен, то

$$[\boldsymbol{J}, H_D] = 0$$

и сохраняется полный момент импульса. Если $A_\mu(x)$ инвариантен относительно отражения в начале координат, то

$$[P, H_D] = 0$$

и сохраняется четность.

§ 19. Обращение времени и зарядовое сопряжение

В этом параграфе мы покажем, что уравнение Дирака инвариантно относительно двух антилинейных операций: обращения времени и зарядового сопряжения. Для этого в пространстве векторов состояния удобно ввести антиунитарный оператор K [1]), который имеет очень простые свойства.

Антиунитарный оператор K. Определим антиунитарный оператор K, который переводит $\boldsymbol{p}$ в $-\boldsymbol{p}$ и не изменяет $\boldsymbol{r}$ и γ^μ:

$$K\boldsymbol{r}K^+ = \boldsymbol{r}, \quad K\boldsymbol{p}K^+ = -\boldsymbol{p}, \tag{119}$$

$$K\gamma^\mu K^+ = \gamma^\mu \quad (\mu = 0, 1, 2, 3). \tag{120}$$

Мы покажем, что такой оператор существует, определен с точностью до фазового множителя и

$$K^2 = -1. \tag{121}$$

То, что оператор K, если он существует, определен с точностью до фазового множителя, следует из соотношений (119), (120) и неприводимости пространства векторов состояния по отношению к базисным операторам $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$ и γ^μ. Выберем какое-либо представление, например, представление Дирака. Тогда каждый *оператор* γ^μ задается некоторой матрицей γ^μ_D. Обозначим B_D оператор, который задается «матрицей B», преобразующей γ^μ_D в их комплексно сопряженные. Мы будем рассматривать B_D как (унитарный) оператор, действующий во всем пространстве, а не только в спиновом. Это унитарный оператор, который коммутирует с $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$. Пусть K_D — оператор комплексного сопряжения, связанный с данным представлением (определение § XV. 5). Соотношения (76) дают

$$\gamma^\mu = B_D (K_D \gamma^\mu K_D^+) B_D^+.$$

[1]) Следует предостеречь, что этот оператор не есть оператор обращения времени, последний ниже будет обозначаться K_T.

Следовательно, антиунитарный оператор

$$K \equiv B_D K_D$$

удовлетворяет соотношениям (120). Поскольку B_D коммутирует с $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$, а из определения K_D имеем

$$K_D \boldsymbol{r} K_D = \boldsymbol{r}, \quad K_D \boldsymbol{p} K_D = -\boldsymbol{p},$$

то K удовлетворяет также соотношениям (119). Наконец, так как $K_D = K_D^{\dagger}$, равенство (77) дает

$$B_D (K_D B_D K_D) \equiv K^2 = -1,$$

т. е. соотношение (121). Очевидно, что при умножении K на фазовый множитель эти свойства сохраняются.

Зарядовое сопряжение. Умножая обе части уравнения (107) слева на K и используя тот факт, что оператор K антилинеен и коммутирует с γ^μ, ∂_μ и $A_\mu(x)$, получаем

$$[\gamma^\mu (-i\partial_\mu - eA_\mu(x)) - m] K\Psi(x) = 0. \tag{122}$$

Следовательно, $K\Psi$ удовлетворяет волновому уравнению, которое отличается от уравнения Дирака заменой $-i$ на i. Умножим получившееся уравнение на γ^5. Так как γ^5 антикоммутирует с γ^μ и коммутирует с остальными операторами, стоящими в скобках, имеем

$$[\gamma^\mu (i\partial_\mu + eA_\mu(x)) - m] \gamma^5 K\Psi(x) = 0. \tag{123}$$

Положим

$$K_C \equiv \gamma^5 K. \tag{124}$$

$$\Psi^C(x) \equiv K_C \Psi(x). \tag{125}$$

Уравнение (123) примет вид

$$[\gamma^\mu (i\partial_\mu + eA_\mu(x)) - m] \Psi^C(x) = 0. \tag{126}$$

Уравнения, которым удовлетворяют функции $\Psi^C(x)$ и $\Psi(x)$, отличаются знаком заряда. Таким образом, *если* $\Psi(x)$ *описывает движение дираковской частицы массы* m *и заряда* e *в потенциале* $A_\mu(x)$, *то* $\Psi^C(x)$ *описывает движение дираковской частицы той же массы* m *и противоположного заряда* $(-e)$ *в том же потенциале* $A_\mu(x)$.

Спиноры Ψ и Ψ^C называются зарядово-сопряженными друг к другу, а преобразование K_C — *зарядовым сопряжением*.

Из свойств K и γ^5 следует, что

$$K_C^2 = 1. \tag{127}$$

Тем самым, соответствие между Ψ и Ψ^C взаимно обратное. Легко показать, что зарядовое сопряжение коммутирует с трансляциями и ортохронными преобразованиями Лоренца. Точнее,

если спинор Ψ при одном из этих преобразований переходит в $L\Psi$, то зарядово-сопряженным к последнему будет спинор $L\Psi^c$ в случае трансляций и собственных преобразований Лоренца и $-L\Psi^c$ — в случае отражения (см. задачу 5).

Обращение времени. Инвариантность уравнения Дирака по отношению к обращению времени можно доказать непосредственно, но в данном случае мы используем результаты о зарядовом сопряжении.

Вектор-потенциал $A_\mu(t, \boldsymbol{r})$ создается некоторым числом движущихся зарядов. Соответствующий ему при обращении времени потенциал $A'_\mu(t, \boldsymbol{r})$ получается при обращении движения этих зарядов. Токи и, следовательно, магнитное поле меняют знак, а электрические заряды и, следовательно, электрическое поле остаются неизменными

$$\mathcal{H}'(t, \boldsymbol{r}) = -\mathcal{H}(-t, \boldsymbol{r}), \quad \mathcal{E}'(t, \boldsymbol{r}) = \mathcal{E}(-t, \boldsymbol{r}).$$

Отсюда следует, что A_μ «преобразуется как псевдовектор»

$$\boldsymbol{A}'(t, \boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{A}(-t, \boldsymbol{r}), \quad A'_0(t, \boldsymbol{r}) = A_0(-t, \boldsymbol{r}).$$

Если в уравнении (126) сделать замену t на $-t$, то получим

$$\left[-\gamma^0(i\partial_0 - eA'_0(t, \boldsymbol{r})) + \sum_k \gamma^k(i\partial_k - eA'_k(t, \boldsymbol{r})) - m\right]\Psi^c(-t, \boldsymbol{r}) = 0.$$

Умножим полученное уравнение на $\gamma^5\gamma^0$. Поскольку этот оператор антикоммутирует с γ^0 и коммутирует с γ^k, имеем

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA'_\mu(t, \boldsymbol{r})) - m]\Psi'(t, \boldsymbol{r}) = 0, \tag{128}$$

где

$$\Psi'(t, \boldsymbol{r}) \equiv \gamma^5\gamma^0\Psi^c(-t, \boldsymbol{r}) = \gamma^0 K\Psi(-t, \boldsymbol{r}). \tag{129}$$

Введем (антиунитарный) оператор обращения времени

$$K_T \equiv \gamma^0 K. \tag{130}$$

Спинор $\Psi'(t, \boldsymbol{r})$ является, по определению, преобразованием $\Psi(-t, \boldsymbol{r})$ при обращении времени. Он удовлетворяет уравнению (128). Следовательно, если Ψ удовлетворяет уравнению Дирака с потенциалом A_μ, то спинор Ψ', получающийся при обращении времени, удовлетворяет уравнению Дирака с потенциалом A'_μ, который при обращении времени получается из A_μ.

В частности, если потенциал A_μ инвариантен по отношению к обращению времени (например, если частица находится в статическом электрическом поле: $\boldsymbol{A} = 0$, $\partial A_0/\partial t = 0$), то Ψ и Ψ' удовлетворяют одному и тому же уравнению Дирака.

Из свойств γ^0 и K следует, что

$$K_T^2 = -1. \tag{131}$$

Это результат, характеризующий системы с полуцелым моментом импульса, уже был получен в нерелятивистском случае (ур. (XV. 88)). Все следствия, которые из него вытекают, например, вырождение Крамерса, справедливы и в данной ситуации.

Выразив оператор B_D в терминах ρ и σ (см. конец § 10), из определений (124) и (130) легко получить равенства

$$K_C = i\rho_2\sigma_y K_D,$$
$$K_T = i\sigma_y K_D,$$

которые используются при работе с операторами K_C и K_T в представлении Дирака.

§ 20. Калибровочная инвариантность

Упомянем здесь для полноты свойство калибровочной инвариантности (см. § XXI. 20).

Изменение калибровки электромагнитного потенциала означает переход от компонент $A_\mu(x)$ к

$$A'_\mu(x) \equiv A_\mu(x) - \partial_\mu G(x), \tag{132}$$

где $G(x)$ — произвольная функция пространственно-временных координат. Это дает

$$A'_0 = A_0 - \frac{\partial G}{\partial t}, \quad \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla G.$$

Электрическое и магнитное поля при таком преобразовании инвариантны.

Если $\Psi(x)$ — решение уравнения Дирака с потенциалом A_μ, то спинор

$$\Psi'(x) \equiv e^{ieG(x)}\Psi(x) \tag{133}$$

есть решение уравнения Дирака с потенциалом A'_μ. Данное свойство и называется калибровочной инвариантностью уравнения Дирака.

Раздел IV. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ОПЕРАТОРОВ И ПРОСТЫЕ РЕШЕНИЯ

§ 21. Уравнение Дирака и принцип соответствия

В случае отличного от нуля электромагнитного поля решения уравнения Дирака удовлетворяют дифференциальному уравнению второго порядка, которое отлично от уравнения Клейна — Гордона, однако и для него выполняется принцип соответствия.

Чтобы получить это уравнение, подействуем оператором $(-i\gamma^\lambda D_\lambda - m)$ на левую часть уравнения Дирака, записанного в ковариантной форме (50),

$$[\gamma^\lambda\gamma^\mu D_\lambda D_\mu + m^2]\Psi = 0. \tag{134}$$

Используя алгебраические свойства операторов γ^μ, получаем

$$\gamma^\lambda\gamma^\mu \equiv g^{\lambda\mu} + \frac{1}{2}[\gamma^\lambda, \gamma^\mu]. \tag{135}$$

Замена немых индексов суммирования дает

$$[\gamma^\lambda, \gamma^\mu] D_\lambda D_\mu \equiv -[\gamma^\lambda, \gamma^\mu] D_\mu D_\lambda = \frac{1}{2}[\gamma^\lambda, \gamma^\mu][D_\lambda, D_\mu] \tag{136}$$

и в силу определения операторов D_μ (ур. (10))

$$[D_\lambda, D_\mu] \equiv ie[\partial_\lambda, A_\mu] + ie[A_\lambda, \partial_\mu] \equiv ie\left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\lambda} - \frac{\partial A_\lambda}{\partial x^\mu}\right) \equiv ieF_{\lambda\mu}. \tag{137}$$

Уравнения (135), (136) и (137) приводят к равенству

$$\gamma^\lambda\gamma^\mu D_\lambda D_\mu \equiv D_\mu D^\mu + eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu}, \tag{138}$$

где $S^{\lambda\mu}$ описывает спин частицы (определение (92)). Таким образом, уравнение (134) можно записать в виде

$$[D_\mu D^\mu + eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu} + m^2]\Psi = 0. \tag{139}$$

Сравнивая с уравнением Клейна — Гордона (30), мы видим, что отличие состоит в наличии дополнительного слагаемого

$$eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu}, \tag{140}$$

которое описывает взаимодействие спина частицы с электромагнитным полем. Это слагаемое не имеет классического аналога и его вклад становится пренебрежимо малым в условиях, когда справедливо классическое приближение. В этих условиях движения волновых пакетов, подчиняющихся уравнениям Дирака и Клейна — Гордона соответственно, одинаковы.

§ 22. Динамические переменные частицы Дирака

Мы уже приводили физическую интерпретацию некоторых динамических переменных теории Дирака. Теперь мы рассмотрим этот вопрос более подробно и укажем те переменные квантовой теории, которые соответствуют приведенным в § 4 различным классическим величинам.

В этом обсуждении релятивистская инвариантность не играет существенной роли. Поэтому мы будем следовать той же схеме изложения, что и в нерелятивистской квантовой механике: система описывается определенным числом динамических переменных, удовлетворяющих заданной алгебре перестановочных соотношений, а уравнение Дирака — в форме Дирака (ур. (36), (44)) — описывает эволюцию динамических состояний системы в «представлении» Шредингера.

Таким образом, далее мы будем рассматривать время в качестве параметра, а пространственные координаты — в качестве динамических переменных. Фундаментальными переменными будут $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$ и α, β. В данном случае можно использовать весь формализм теории представлений без изменения. В частности, в представлении Дирака векторы состояния $|\Psi\rangle$, $|\Phi\rangle$, ... описываются четырехкомпонентными волновыми функциями $\Psi(\boldsymbol{r})$, $\Phi(\boldsymbol{r})$, ..., зависящими от координат x, y, z. Скалярное произведение $\langle\Phi|\Psi\rangle$ в этом представлении определяется следующей формулой:

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_{s=1}^{4} \int \varphi_s^*(\boldsymbol{r})\,\psi_s(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}.$$

Такое определение скалярного произведения согласуется с определением плотности вероятности положения частицы в пространстве, приведенном в § 6 (формула (35)). Более того, мы можем использовать здесь без изменений статистическую интерпретацию, которая была развита в первой части этого курса. В частности, среднее значение оператора Q в данном состоянии равно

$$\langle Q\rangle = \langle u|\,Q\,|u\rangle,$$

где $|u\rangle$ — нормированный кет-вектор, представляющий данное состояние.

Те наблюдаемые, которые не действуют на внутренние степени свободы, имеют очевидную интерпретацию. Например,

$\boldsymbol{r}$ — вектор положения (координата);

$\boldsymbol{p}$ — импульс;

$\boldsymbol{\pi} \equiv \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ — количество движения.

Среди функций от $\boldsymbol{r}$ отметим $\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$ — проектор на подпространство, отвечающее собственному значению $\boldsymbol{r}_0$.

Среди наблюдаемых, зависящих от внутренних степеней свободы, отметим [1]):

энергию: $H \equiv e\varphi + \alpha\pi + \beta m$; (141)

релятивистскую массу: $M \equiv H - e\varphi \equiv \alpha\pi + \beta m$; (142)

плотность потока: $j(r_0) \equiv \alpha\delta(r - r_0)$; (143)

полный момент импульса: $J \equiv (r \times p) + \frac{1}{2}\sigma$; (144)

спин: $S \equiv \frac{1}{2}\sigma$; (145)

четность: $P \equiv \beta P^{(0)}$. (146)

Определения величин H и M основаны на соответствии с классической механикой. Что касается определения $j(r_0)$, то оно следует из уравнения непрерывности, а определения J, S и P связаны с законами преобразования состояний при вращениях и отражении соответственно.

Наконец, *принцип соответствия приводит к интерпретации переменной α как скорости частицы.* К этой интерпретации приводит также выражение для плотности потока. Действительно, сравним уравнения (18), (19) и (21) классической теории с соответствующими уравнениями квантовой теории. Для этого нам нужно перейти к «представлению» Гейзенберга, где уравнения движения для r и π имеют вид

$$dr/dt = -i[r, H],$$
$$d\pi/dt = -i[\pi, H] + \partial\pi/\partial t.$$

Заменяя H и π в правой части этих уравнений их явными выражениями и используя перестановочные соотношения для r, p, α и β, получаем (задача 6)

$$dr/dt = \alpha, \quad (147)$$
$$d\pi/dt = e(\mathscr{E} + \alpha \times \mathscr{H}). \quad (148)$$

Из определения (142) и свойств оператора α имеем тождество

$$\pi = \frac{1}{2}(M\alpha + \alpha M). \quad (149)$$

Уравнения (147)—(149) для динамических переменных в «представлении» Гейзенберга совпадают по виду с уравнениями (18), (19) и (21) классической теории, если считать, что α совпадает со скоростью v.

[1]) Отметим, что импульс p зависит от выбора калибровки; только полный импульс системы (частица + электромагнитное поле) не зависит от этого выбора. Такое же замечание можно сделать об энергии H и моменте импульса J (см. § XXI. 23).

Здесь следует отметить, что компоненты скорости $\boldsymbol{\alpha}$ не коммутируют друг с другом, а кроме того, каждая компонента имеет только два собственных значения $+c$ и $-c$ ($+1$ и -1 в используемых нами единицах измерения). Это еще раз показывает, что развитую классическую интерпретацию нельзя понимать слишком буквально. Мы вернемся к этому вопросу в § 37.

§ 23. Свободный электрон. Плоские волны

В оставшейся части этого раздела мы рассмотрим решения уравнения Дирака при отсутствии внешнего поля и в статическом центральном потенциале. Чтобы решить уравнение Дирака, достаточно найти собственные функции гамильтониана H_D. Далее, если не оговорено противное, мы будем использовать представление Дирака, а также введенные в § 7 операторы ρ_1, ρ_2, ρ_3 и σ_x, σ_y, σ_z.

Пусть внешнее поле равно нулю. Тогда гамильтониан H_D коммутирует с тремя компонентами импульса, и, следовательно, мы можем искать собственные функции H_D, отвечающие вполне определенному значению импульса $\boldsymbol{p}$. Такими решениями будут плоские волны — функции вида

$$u(\boldsymbol{p})\, e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}},$$

где $u(\boldsymbol{p})$ — не зависящий от $\boldsymbol{r}$ четырехкомпонентный спинор. Он определяется из уравнения на собственные значения

$$Hu(\boldsymbol{p}) = Eu(\boldsymbol{p}), \tag{150}$$

где H — оператор в пространстве $\mathscr{E}^{(s)}$

$$H \equiv \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p} + \beta m \equiv \rho_1(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p}) + \rho_3 m. \tag{151}$$

Несложное вычисление дает

$$H^2 = \boldsymbol{p}^2 + m^2.$$

Следовательно, собственными значениями H могут быть только два значения $\pm\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}$:

$$\begin{aligned} E &= \varepsilon E_p \qquad (\varepsilon = \pm 1) \\ E_p &= \sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}. \end{aligned} \tag{152}$$

Легко показать, используя, например, антикоммутативность ρ_2 и H, что эти собственные значения двукратно вырождены.

Как видно из формулы (151), *компонента спина* $\boldsymbol{\sigma p}/2p$ *в направлении* $\boldsymbol{p}$ *коммутирует с* H. (Другие компоненты спина с H не коммутируют.) Таким образом, мы можем искать собствен-

ные векторы, общие для H и $\sigma p/2p$. Имеем четыре пары собственных значений:

$$\left(+E_p, +\tfrac{1}{2}\right), \quad \left(+E_p, -\tfrac{1}{2}\right), \quad \left(-E_p, +\tfrac{1}{2}\right), \quad \left(-E_p, -\tfrac{1}{2}\right).$$

Каждой паре отвечает одно собственное состояние. Соответствующий спинор несложно найти из двух уравнений на собственные значения. Другой метод построения этого спинора мы приведем в следующем параграфе.

В табл. IV содержатся компоненты собственных спиноров (нормированных на единицу) в случае, когда импульс $\boldsymbol{p}$ направлен по оси z. Напомним, что в представлении Дирака β и σ_z — диагональные матрицы.

Таблица IV

Компоненты спиноров, соответствующих волне с импульсом $\boldsymbol{p}=(0, 0, p)$ в представлении Дирака $\left(E_p=\sqrt{m^2+p^2}\right)$

Энергия $E=$	Положительная $+E_p$		Отрицательная $-E_p$	
Спин $\sigma p/2p \equiv \frac{1}{2}\sigma_z$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\left(\frac{2E_p}{E_p+m}\right)^{\frac{1}{2}} \times \begin{cases} u_1 = \\ u_2 = \\ u_3 = \\ u_4 = \end{cases}$	$\begin{matrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p}{E_p+m} \\ 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{p}{E_p+m} \end{matrix}$	$\begin{matrix} -\frac{p}{E_p+m} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ \frac{p}{E_p+m} \\ 0 \\ 1 \end{matrix}$
Спиноры нормированы на единицу: $u^+u=1$				

§ 24. Построение плоских волн посредством преобразования Лоренца

Если $A_\mu=0$, то преобразование Лоренца переводит решение уравнения Дирака в решение того же уравнения. В частности, плоскую волну с импульсом $\boldsymbol{p}$ можно получить преобразованием Лоренца из плоской волны с нулевым импульсом. На этом замечании основан метод, который позволит нам построить спиноры $u(\boldsymbol{p})$, приведенные в предыдущем параграфе.

Для нулевого импульса уравнение (150) принимает вид

$$\beta m\, u\,(0) = E u\,(0).$$

Два возможных собственных значения равны $+m$ и $-m$. Собственному значению εm ($\varepsilon = \pm 1$) отвечает спинор $u^{(\varepsilon)}(0)$ — собственный вектор оператора β. Будем предполагать, что этот спинор нормирован на единицу, направление спина фиксируем произвольным образом. Тогда $u^{(\varepsilon)}(0)$ определен с точностью до фазы.

Плоская волна

$$\Psi_0^{(\varepsilon)} = u^{(\varepsilon)}(0)\, e^{-i\varepsilon m t}$$

есть решение уравнения Дирака, соответствующее нулевому импульсу и энергии εm или 4-вектору энергии-импульса $(\varepsilon m, 0)$.

Рассмотрим то же решение в новой системе отсчета, движущейся по отношению к исходной со скоростью $v = -p/\varepsilon\sqrt{m^2 + p^2} = -p/\varepsilon E_p$. В новой системе отсчета 4-вектор энергии-импульса равен

$$p^\mu \equiv (\varepsilon E_p, \boldsymbol{p}). \tag{153}$$

Решением будет плоская волна

$$\Psi_p^{(\varepsilon)} = \Lambda_{sp}(v)\, u^{(\varepsilon)}(0) \exp\left(-ip^\mu x_\mu\right) = \left[\Lambda_{sp}(v)\, u^{(\varepsilon)}(0)\right] \exp\left[-i(\varepsilon E_p t - \boldsymbol{pr})\right].$$

Таким образом, выражение в скобках пропорционально искомому спинору $u(\boldsymbol{p})$, который далее мы будем обозначать $u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p})$. Его норма равна временной компоненте соответствующего 4-вектора потока, который можно получить посредством преобразования Лоренца из 4-вектора потока, связанного с $u^{(\varepsilon)}(0)$. Эта норма в результате равна

$$b \equiv \sqrt{1 - v^2} = E_p/m.$$

Таким образом, мы определяем

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) \equiv b^{-\frac{1}{2}} \Lambda_{sp}(v)\, u^{(\varepsilon)}(0).$$

Подставляя в это определение выражение (97) и приведенные выше значения v и b, находим

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) = [2E_p(m + E_p)]^{-\frac{1}{2}} [m + E_p + \varepsilon\boldsymbol{\alpha p}]\, u^{(\varepsilon)}(0). \tag{154}$$

В частности, если $u^{(\varepsilon)}(0)$ — собственный вектор для $(\boldsymbol{\sigma p})$, то и $u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p})$ — собственный вектор, который совпадает с одним из спиноров предыдущего параграфа. Если импульс $\boldsymbol{p}$ направлен по оси z, то получаем результаты, приведенные в табл. IV.

Выражение (154) можно записать также в виде

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) = [2E_p(m + E_p)]^{-\frac{1}{2}} [m + \gamma^\mu p_\mu]\, u^{(\varepsilon)}(0), \tag{155}$$

где p_μ — определенный формулой (153) 4-вектор энергии-импульса.

§ 25. Центральный потенциал

Исследуем состояния дираковской частицы, находящейся в статическом центральном потенциале $V(r)$. Гамильтониан Дирака в этом случае имеет вид

$$H_D \equiv \boldsymbol{\alpha p} + \beta m + V(r). \tag{156}$$

Он инвариантен относительно вращений и отражений

$$[H_D, \boldsymbol{J}] = 0, \quad [H_D, P] = 0.$$

Таким образом, мы можем искать решения, соответствующие определенному моменту импульса и четности.

Удобно записать решение в виде

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{157}$$

где

$$\Phi \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi \equiv \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \tag{158}$$

Проектируя Ψ на подпространства, отвечающие $\beta = +1$ и $\beta = -1$, находим

$$\frac{1}{2}(1+\beta)\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}(1-\beta)\Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}. \tag{159}$$

Функции Φ и χ зависят от $\boldsymbol{r}$ и компоненты спина μ по оси z. Их можно рассматривать как функции радиальной переменной r и «угловых переменных» (θ, φ, μ) в полной аналогии с волновыми функциями теории Паули.

Будем считать, что Ψ есть собственная функция операторов $\boldsymbol{J}^2$, J_z и P. Квантовые числа момента импульса обозначим (JM). Четность будем указывать посредством квантового числа ω такого, что

$$\omega = \begin{cases} +1 & \text{для состояний с четностью } (-1)^{J+\frac{1}{2}}, \\ -1 & \text{для состояний с четностью } (-1)^{J-\frac{1}{2}}. \end{cases} \tag{160}$$

Итак, согласно предположению,

$$\begin{gathered} \boldsymbol{J}^2 \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = J(J+1) \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad J_z \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}, \\ P \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = (-1)^{J+\frac{1}{2}\omega} \begin{pmatrix} \Phi \\ -\chi \end{pmatrix}. \end{gathered} \tag{161}$$

Пусть $\mathcal{Y}^M_{LJ}(\theta, \varphi, \mu)$ — функция с полным моментом (JM), образованная композицией собственных векторов для спина 1/2 со сферическими функциями порядка L. Четность этой функции равна $(-1)^L$. В силу теоремы о сложении моментов импульса L может принимать только два значения

$$L = l \equiv J + \frac{1}{2}\omega, \quad L = l' \equiv J - \frac{1}{2}\omega, \tag{162}$$

а функции $\mathcal{Y}^M_{lJ}$ и $\mathcal{Y}^M_{l'J}$ имеют противоположную четность: $(-1)^{J+\frac{1}{2}\omega}$ и $(-1)^{J-\frac{1}{2}\omega}$ соответственно. Из уравнений (161) за-

ключаем, что функция Φ, зависящая от $(r, \theta, \varphi, \mu)$, отвечает моменту импульса (JM) и четности $(-1)^{J+\frac{1}{2}\omega}$. Следовательно, эта функция равна произведению функции от r на $\mathcal{Y}^M_{lJ}$. Аналогично, функция χ равна произведению функции от r на $\mathcal{Y}^M_{l'J}$.

Итак, если $\Psi^M_{\omega J}$ описывает состояние с моментом импульса (JM) и четностью $(-1)^{J+\frac{1}{2}\omega}$, то эта функция может быть представлена в виде

$$\Psi^M_{\omega J} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} F\,\mathcal{Y}^M_{lJ} \\ iG\,\mathcal{Y}^M_{l'J} \end{pmatrix}, \tag{163}$$

где l и l' определяются равенствами (162), а F и G — произвольные функции от r.

Рассмотрим теперь уравнение на собственные значения

$$H_D\Psi^M_{\omega J} = E\Psi^M_{\omega J}. \tag{164}$$

Следуя методу, использованному в главе IX, проведем в операторе H_D разделение «угловых» и радиальных переменных.

Введем радиальный импульс p_r и «радиальную скорость» α_r

$$p_r \equiv -i\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r, \tag{165}$$

$$\alpha_r \equiv \alpha\hat{r} = \rho_1(\sigma r)/r. \tag{166}$$

Воспользовавшись тождеством (XIII.83), получаем

$$(\alpha r)(\alpha p) = (\sigma r)(\sigma p) = rp + i\sigma L = rp_r + i(1 + \sigma L).$$

Отсюда, после умножения слева на α_r/r и использования равенства $\alpha_r^2 = 1$, следует тождество

$$\alpha p \equiv \alpha_r\left(p_r + \frac{i}{r}(1 + \sigma L)\right). \tag{167}$$

Исследуем оператор $1 + \sigma L$. Легко показать, что

$$1 + \sigma L = J^2 + \frac{1}{4} - L^2.$$

Далее, из формулы (161) ясно, что действие L^2 на $\Psi^M_{\omega J}$ сводится к умножению на

$$\left(J + \frac{1}{2}\omega\beta\right)\left(J + \frac{1}{2}\omega\beta + 1\right) \equiv J(J+1) + \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\omega\beta(2J+1).$$

Следовательно,

$$(1 + \sigma L)\Psi^M_{\omega J} = -\frac{1}{2}\omega(2J+1)\beta\Psi^M_{\omega J}. \tag{168}$$

Подставляя соотношения (167) и (168) в уравнение (164), получаем

$$\left[\alpha_r\left(p_r - \frac{i\omega\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\beta\right) + m\beta + V(r)\right]\Psi^M_{\omega J} = E\Psi^M_{\omega J}.$$

Воспользуемся в этом уравнении выражением (163) для собственной функции, определениями (165) и (166) операторов p_r и α_r и равенствами (задача 8)

$$\begin{aligned}(\widehat{\sigma r})\,\mathcal{Y}^M_{lJ} &= -\mathcal{Y}^M_{l'J},\\ (\widehat{\sigma r})\,\mathcal{Y}^M_{l'J} &= -\mathcal{Y}^M_{lJ}.\end{aligned} \tag{169}$$

Тогда уравнение перейдет в систему из двух дифференциальных уравнений для радиальных функций $F(r)$ и $G(r)$

$$\left[-\frac{d}{dr} + \frac{\omega\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]G = (E - m - V)F, \tag{170а}$$

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{\omega\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F = (E + m - V)G. \tag{170б}$$

Эти уравнения аналогичны уравнению (IX. 20) нерелятивистской теории.

После интегрирования по углам для нормы функции $\Psi^M_{\omega J}$ получаем выражение

$$\left\langle \Psi^M_{\omega J} \middle| \Psi^M_{\omega J} \right\rangle = \int_0^\infty (|F|^2 + |G|^2)\,dr, \tag{171}$$

которое естественно сравнить с формулой (IX. 21).

Обсуждение свойств регулярности функций F и G можно провести в полной аналогии с тем, что было сделано для функции $\chi_l(r)$ в нерелятивистской теории. На деталях мы здесь не останавливаемся.

§ 26. Свободные сферические волны

Если потенциал V равен нулю, то полученные в предыдущем параграфе стационарные решения уравнения Дирака для свободного электрона соответствуют определенным моменту импульса и четности и представляют собой свободные сферические волны.

В этом случае, из уравнения (170б) находим

$$G = \frac{1}{E+m}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\omega\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F. \tag{172}$$

Подставляя это выражение в ур. (170а), получаем

$$(E^2-m^2)F=\left[-\frac{d}{dr}+\frac{\omega\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]\left[\frac{d}{dr}+\omega\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F=$$

$$=\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)\left(J+\omega+\frac{1}{2}\right)}{r^2}\right]F.$$

Легко показать, что

$$\left(J+\tfrac{1}{2}\right)\left(J+\omega+\tfrac{1}{2}\right)=l(l+1),$$

где l — целое число (см. ур. (162)). Таким образом, полученное уравнение совпадает с радиальным уравнением для свободной частицы в нерелятивистской теории, если к тому же заменить E^2-m^2 на произведение $2m$ и нерелятивистской энергии. Это уравнение имеет одно и только одно регулярное решение для любой положительной величины E^2-m^2. Введя обозначение $k=\sqrt{E^2-m^2}$ ($|E|\geqslant m$), перепишем уравнение в виде

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+k^2\right]F=0.$$

Регулярное решение (с точностью до постоянного множителя) равно

$$F=rj_l(kr).$$

Соответствующая функция G легко получается по формуле (172). Используя рекуррентные соотношения (Б. 42) и (Б. 43) (первое — при $\omega=1$, второе — при $\omega=-1$; в обоих соотношениях положили $\gamma=0$), находим

$$G=\frac{\omega k}{E+m}rj_{l'}(kr).$$

Итак, для любого значения энергии E вне интервала $(-m, +m)$ существует свободная сферическая волна с моментом импульса (JM) и четностью $(-1)^{J+\frac{1}{2}\omega}$, которая (см. ур. (163)) может быть записана в виде

$$\text{const}\cdot\begin{pmatrix}|E+m|^{\frac{1}{2}}\,j_l(\sqrt{E^2-m^2}\,r)\,\mathcal{Y}^M_{lJ}\\ i\omega\varepsilon\,|E-m|^{\frac{1}{2}}\,j_{l'}(\sqrt{E^2-m^2}\,r)\,\mathcal{Y}^M_{l'J}\end{pmatrix}, \qquad (173)$$

где $\varepsilon=E/|E|$.

§ 27. Атом водорода

В качестве второго примера исследуем связанные состояния электрона в кулоновском поле атомного ядра. Последнее будем считать точечным зарядом, равным заряду электрона, умноженному на $(-Z)$, и покоящимся в начале координат[1]). Мы будем интересоваться связанными состояниями релятивистской частицы спина 1/2 в центральном потенциале

$$V = -Ze^2/r.$$

Эта задача на собственные значения может быть решена точно. Здесь мы опишем только основные моменты метода решения, который представляет собой простое расширение метода, использованного в § XI. 4.

Из анализа асимптотического поведения решений системы радиальных уравнений (170) ясно, что энергия E должна лежать в интервале $(-m, +m)$. Искомое собственное значение характеризуется тем, что соответствующее решение должно быть регулярно в начале координат и на бесконечности вести себя, как $\exp(-\sqrt{m^2-E^2}r)$.

Введем обозначения

$$\varkappa = \sqrt{m^2-E^2}, \quad \nu = \sqrt{\frac{m-E}{m+E}}. \tag{174}$$

$$\zeta = Ze^2, \qquad \tau = \omega\left(J+\frac{1}{2}\right) \tag{175}$$

и новую переменную

$$\rho \equiv \varkappa r. \tag{176}$$

Тогда система уравнений (170) примет вид

$$\left(-\frac{d}{d\rho}+\frac{\tau}{\rho}\right)G = \left(-\nu+\frac{\zeta}{\rho}\right)F \tag{177а}$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{\tau}{\rho}\right)F = \left(\nu^{-1}+\frac{\zeta}{\rho}\right)G. \tag{177б}$$

Будем искать решения в виде рядов

$$F(\rho) = \rho^s e^{-\rho}(a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \ldots) \quad (a_0 \neq 0), \tag{178а}$$

$$G(\rho) = \rho^s e^{-\rho}(b_0 + b_1\rho + b_2\rho^2 + \ldots) \quad (b_0 \neq 0). \tag{178б}$$

Подставляя эти разложения в систему (177) и приравнивая члены соответствующих порядков, получаем набор уравнений, первое из которых определяет s, а последующие представ-

[1]) Тем самым, ядро считается бесконечно тяжелым. Возникающей при этом ошибкой пренебречь нельзя, поскольку она по порядку величины сравнима с релятивистскими поправками. Эта ошибка существенно уменьшается, если во всех формулах массу электрона m заменить приведенной массой.

ляют собой рекуррентные соотношения для коэффициентов a_0, b_0, a_1, ..., a_n, b_n, ... Уравнение для s имеет два корня $\pm\sqrt{\tau^2-\zeta^2}$. Для регулярности решений F и G и выполнения условия $F(0)=G(0)=0$ необходимо и достаточно, чтобы $s>0$. Так выбирается положительный корень [1])

$$s=\sqrt{\tau^2-\zeta^2}.$$

Следовательно, для любого значения E существует одно решение, регулярное в начале координат. В общем случае, это решение на бесконечности ведет себя, как $\rho^s e^{\rho}$, если только разложения (178) не обрываются. Последнее возможно только для специальных значений E — искомых уровней энергии. Вычисление показывает, что эти значения равны

$$m\left[1+\frac{\zeta^2}{(n'+s)^2}\right]^{-\frac{1}{2}},$$

где n' — радиальное квантовое число — равно степени полиномов, фигурирующих в разложениях (178). Для каждого положительного n' существует регулярное решение при любом из двух значений ω; для $n'=0$ регулярное решение существует только при $\omega=-1$.

Введем главное квантовое число

$$n=J+\frac{1}{2}+n'.$$

Тогда предыдущие результаты можно сформулировать следующим образом. Уровни дискретного спектра зависят от двух квантовых чисел n и J и определяются формулой

$$E_{nJ}=m\left[1+\frac{Z^2e^4}{(n-\varepsilon_J)^2}\right]^{-\frac{1}{2}}, \tag{179}$$

$$\varepsilon_J=J+\frac{1}{2}-\sqrt{\left(J+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2e^4}, \tag{179'}$$

где n может принимать все целые положительные значения, а J — все полуцелые значения из интервала $(0, n)$

$$n=1,\ 2,\ \ldots,\ \infty,\quad J=\frac{1}{2},\ \frac{3}{2},\ \ldots,\ n-\frac{1}{2}.$$

---

[1]) Мы предполагаем, что $\zeta<|\tau|$, т. е. $Ze^2<\left(J+\frac{1}{2}\right)$. Это условие выполнено, если $Z<137$, что практически почти всегда имеет место. В противном случае обсуждение условий регулярности в начале координат стало бы значительно более деликатным вопросом.

Каждому значению J соответствуют два набора из $(2J+1)$ решений противоположной четности, за исключением значения $J=n-\frac{1}{2}$, которому соответствует один набор из $(2J+1)$ решений четности $(-1)^{n-1}$. Вместо того, чтобы фиксировать четность, можно фиксировать величину l — значение орбитального момента двух первых компонент спинора. Напомним, что четность спинора равна $(-1)^l$.

Для энергетических уровней и состояний обычно используют спектроскопические обозначения nl_j. Ниже приведены несколько первых уровней и соответствующие спектроскопические термы (вырождение каждого терма равно $2J+1$):

$$
\begin{array}{llllll}
n=1 & J=\frac{1}{2} & 1s_{\frac{1}{2}} & & & (n'=0)\\
n=2 & J=\frac{1}{2} & 2s_{\frac{1}{2}} & 2p_{\frac{1}{2}} & & (n'=1)\\
 & J=\frac{3}{2} & & 2p_{\frac{3}{2}} & & (n'=0)\\
n=3 & J=\frac{1}{2} & 3s_{\frac{1}{2}} & 3p_{\frac{1}{2}} & & (n'=2)\\
 & J=\frac{3}{2} & & 3p_{\frac{3}{2}} & 3d_{\frac{3}{2}} & (n'=1)\\
 & J=\frac{5}{2} & & & 3d_{\frac{5}{2}} & (n'=0).
\end{array}
$$

Если выражение (179) разложить в ряд по степеням Z^2e^4, то получим

$$E_{nJ}=m\left[1-\frac{Z^2e^4}{2n^2}-\frac{(Z^2e^4)^2}{2n^4}\left(\frac{n}{J+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)+\ \dots\right].$$

Первое слагаемое — масса электрона. Второе $-Z^2e^4/2n^2$, в точности совпадает с результатом нерелятивистской теории. Следующие слагаемые определяют релятивистские поправки, которые частично устраняют «случайное вырождение» уровней нерелятивистской теории: при фиксированном n энергия связи $m-E$ каждого терма зависит только от J и тем больше, чем меньше J.

Экспериментальные результаты о тонкой структуре спектра атома водорода или водородоподобных атомов (а именно, He^+) находятся в хорошем согласии с этими предсказаниями.

Однако совпадение результатов не является полным. Наибольшее расхождение наблюдается в тонкой структуре уровней

с $n = 2$ атома водорода [1]). В нерелятивистском приближении три уровня $2s_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{1}{2}}$ и $2p_{\frac{3}{2}}$, совпадают. В теории Дирака уровни $2s_{\frac{1}{2}}$ и $2p_{\frac{1}{2}}$ остаются равными, а уровень $2p_{\frac{3}{2}}$ расположен ниже (расстояние между ними порядка 10^{-4} *эв*). Расстояние $2p_{\frac{3}{2}} - 2p_{\frac{1}{2}}$ согласуется с предсказаниями теории, в то же время уровень $2s_{\frac{1}{2}}$ расположен ниже уровня $2p_{\frac{1}{2}}$ и величина $2s_{\frac{1}{2}} - 2p_{\frac{1}{2}}$ равна приблизительно одной десятой расстояния $2p_{\frac{3}{2}} - 2p_{\frac{1}{2}}$. Этот эффект называют лэмбовским сдвигом. Для его объяснения необходимо строгое рассмотрение полного взаимодействия между электроном, протоном и квантованным электромагнитным полем. В теории Дирака учитывается только основная часть этого взаимодействия — кулоновский потенциал. Лэмбовский сдвиг связан с «радиационными поправками» к этому приближению [2]).

Раздел V. НЕРЕЛЯТИВИСТСКИЙ ПРЕДЕЛ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА

§ 28. Большие и малые компоненты

Рассмотрим плоские волны с положительной энергией. Компоненты этих волн приведены в табл. IV. Будем считать, что энергия E_p мало отличается от энергии покоя

$$W \equiv E_p - m \ll m.$$

Тогда можно воспользоваться нерелятивистским приближением, поскольку кинетическая энергия W почти равна $mv^2/2$ и справедливо неравенство

$$\frac{W}{m} \approx \frac{1}{2} v^2 \ll 1.$$

Мы увидим, что в этом случае отличная от нуля компонента соответствует $\beta = +1$ и по величине она значительно больше

---

[1]) *W. E. Lamb, R. C. Retherford.* Phys. Rev. **72**, 241 (1947).

[2]) Экспериментальное значение величины $2s_{\frac{1}{2}} - 2p_{\frac{1}{2}}$ равно $1057,77 \pm 0,10$ *Мц/сек* (мегациклов в секунду); теоретическое значение, полученное при учете «радиационных поправок», существование которых предсказывается квантовой электродинамикой, равно $1057,99 \pm 0,2$ *Мц/сек* (*C. M. Sommerfield.* Phys. Rev. **107**, 328 (1957)).

компоненты, которая соответствует $\beta = -1$,

$$\sigma_z = +1, \quad \frac{u_3}{u_1} = \left(\frac{W}{W+2m}\right)^{\frac{1}{2}} \approx O\left(\frac{v}{c}\right) \ll 1,$$

$$\sigma_z = -1, \quad \frac{u_4}{u_2} = -\left(\frac{W}{W+2m}\right)^{\frac{1}{2}} \approx O\left(\frac{v}{c}\right) \ll 1.$$

Аналогичное утверждение справедливо для сферических волн (см. выражение (173)) и для собственных функций атома водорода (см., например, собственные функции, определенные в задаче 10). Все это позволяет предположить, что в нерелятивистском приближении две компоненты Ψ_3 и Ψ_4 спинора Ψ, отвечающие собственному значению -1 оператора β, очень малы по абсолютной величине. Следовательно, ими можно пренебречь и теория Дирака становится при этом эквивалентной двухкомпонентной теории.

Чтобы продемонстрировать эту эквивалентность явно, запишем дираковский спинор Ψ в виде (157), где Φ и χ определяются уравнениями (158), (159). Как мы уже отмечали в § 25, величины Φ и χ можно рассматривать как векторы пространства состояний двухкомпонентной нерелятивистской теории.

В этих обозначениях уравнение Дирака для стационарного состояния с энергией E в представлении Дирака принимает вид

$$(\sigma(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}))\chi + (e\varphi + m)\Phi = E\Phi, \tag{180а}$$

$$(\sigma(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}))\Phi + (e\varphi - m)\chi = E\chi. \tag{180б}$$

Введем обозначения:

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}, \quad M = E - e\varphi,$$
$$W = E - m, \quad M' = \frac{1}{2}(m + M) = m + \frac{1}{2}(W - e\varphi). \tag{181}$$

Определив из уравнения (180б) спинор χ и подставив его в уравнение (180а), получим

$$\chi = \frac{1}{2M'}(\sigma\boldsymbol{\pi})\Phi, \tag{182}$$

$$\left[(\sigma\boldsymbol{\pi})\frac{1}{2M'}(\sigma\boldsymbol{\pi}) + e\varphi\right]\Phi = W\Phi. \tag{183}$$

Уравнения (182)—(183) *полностью эквивалентны* уравнению Дирака.

В нерелятивистском пределе справедливы соотношения

$$W,\ e\varphi,\ \boldsymbol{p},\ e\boldsymbol{A} \ll m, \quad M' \approx m, \tag{184}$$

и из уравнения (182) ясно, что $\chi \ll \Phi$, а отношение этих двух величин порядка p/m, т. е. v/c. Спиноры χ и Φ называются *малыми и большими компонентами* соответственно.

Далее в этом разделе мы будем использовать понятие *«четных»* и *«нечетных» операторов*. По определению:

(i) оператор $\mathscr{P}$ называется «четным», если все его матричные элементы между малыми и большими компонентами равны нулю (например, $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{J}, P(r_0), \beta$);

(ii) оператор $\mathscr{T}$ называется «нечетным», если у него не равны нулю только матричные элементы между малыми и большими компонентами (например, $\boldsymbol{\alpha}, \beta\boldsymbol{\alpha}, \gamma^5, j(r_0)$).

Это определение эквивалентно тому условию, что оператор $\mathscr{P}$ коммутирует с β, а оператор $\mathscr{T}$ антикоммутирует с β

$$\mathscr{P} = \beta\mathscr{P}\beta, \quad \mathscr{T} = -\beta\mathscr{T}\beta. \tag{185}$$

Любой оператор Q можно однозначно представить в виде суммы «четного» и «нечетного» операторов

$$Q = \frac{1}{2}[Q + \beta Q\beta] + \frac{1}{2}[Q - \beta Q\beta].$$

Произведение двух «четных» или двух «нечетных» операторов есть «четный» оператор; произведение «четного» оператора на «нечетный» есть «нечетный» оператор.

§ 29. Теория Паули как нерелятивистский предел теории Дирака

Вернемся к системе уравнений (182)—(183). Если пренебречь малыми компонентами, то в нормировке волновой функции мы получим ошибку порядка v^2/c^2. Ошибка того же порядка возникает, если в уравнении (183) оператор M' заменить массой m. В этом приближении уравнение (183) принимает вид уравнения на собственные значения [1])

$$H_{\text{п. г.}}\Phi = W\Phi \tag{186}$$

для гамильтониана

$$H_{\text{п. г.}} \equiv \frac{1}{2m}(\sigma\pi)(\sigma\pi) + e\varphi, \tag{187}$$

который действует на двухкомпонентную волновую функцию Φ. Уравнение (186) определяет энергию W с точностью до v^2/c^2.

Чтобы привести оператор $H_{\text{п.г}}$ к более привычному виду, воспользуемся тождеством (XIII. 83) и учтем некоммутативность компонент векторного оператора $\boldsymbol{\pi}$:

$$\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi} = ie \operatorname{rot} \boldsymbol{A} = ie\mathscr{H}.$$

[1]) Исходное уравнение (183) не является уравнением на собственные значения, поскольку стоящий в левой части оператор зависит от собственного значения W, которое участвует в определении M'.

Отсюда следует, что

$$H_{\text{п. г.}} \equiv \frac{1}{2}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 - \frac{e}{2m}(\sigma\mathscr{H}) + e\varphi. \tag{188}$$

Мы получили гамильтониан теории Паули для частицы с массой m, зарядом e и внутренним магнитным моментом $\boldsymbol{\mu} = \mu_B\boldsymbol{\sigma}$, где $\mu_B = e/2m$ — магнетон Бора.

Таким образом, теория Дирака не только предсказывает существование внутреннего магнитного момента, но и дает его правильное численное значение (§ XIII. 18). Это одно из наибольших достижений теории [1]).

Для доказательства эквивалентности теории Дирака в рассматриваемом здесь приближении двухкомпонентной теории Паули мы должны указать операторы, соответствующие операторам теории Дирака, но действующие только в подпространстве больших компонент.

Это можно сделать, если в вычислениях с интересующими нас операторами участвуют только их матричные элементы между состояниями Ψ', Ψ'' с положительной энергией, близкой к массе покоя. Последнее условие необходимо для обоснования нерелятивистского приближения.

В случае четного оператора $\mathscr{P}$ матричный элемент $\langle\Psi''|\mathscr{P}|\Psi'\rangle$ представим в виде суммы

$$\langle\Phi''|\mathscr{P}|\Phi'\rangle + \langle\chi''|\mathscr{P}|\chi'\rangle.$$

Второе слагаемое имеет порядок $(v/c)^2$ по сравнению с первым и в рассматриваемом здесь приближении им можно пренебречь. Тем самым оператор $\mathscr{P}$ можно заменить его проекцией на подпространство больших компонент. Эта проекция в нерелятивистской теории Паули описывает физическую величину, которая в теории Дирака задается оператором $\mathscr{P}$.

---

[1]) В действительности, экспериментальное значение μ_{exp} несколько отличается от теоретического значения магнитного момента электрона (*P. Kusch, H. M. Foley.* Phys. Rev. **72**, 1256 (1947)). Согласно последним данным

$$\Delta\mu_{\text{exp}} \equiv \mu_{\text{exp}} - \mu_B = (1{,}165 \pm 0{,}011)\cdot 10^{-3}\,\mu_B.$$

«Радиационные поправки» квантовой электродинамики приводят к существованию аномального магнитного момента, что дает (*Sommerfield*, loc. cit.)

$$\Delta\mu_{\text{th}} = 1{,}163\cdot 10^{-3}\,\mu_B.$$

Отметим еще, что добавление к оператору Дирака члена $\varkappa\mu_B\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ приводит к уравнению, которое обладает теми же свойствами инвариантности, что и уравнение Дирака, при любой константе $\varkappa$. В результате такое уравнение описывает частицу с массой m, зарядом e и внутренним магнитным моментом $(1+\varkappa)\,\mu_B$.

Для нечетного оператора $\mathcal{T}$ имеем

$$\langle\Psi''|\mathcal{T}|\Psi'\rangle = \langle\Phi''|\mathcal{T}|\chi'\rangle + \langle\chi''|\mathcal{T}|\Phi'\rangle.$$

Малые компоненты входят в каждое слагаемое этой суммы. Однако в силу уравнения (182) и нерелятивистского приближения справедливы равенства

$$|\chi\rangle = \rho_1 \frac{\sigma\pi}{2m}|\Phi\rangle,$$

$$\langle\Psi''|\mathcal{T}|\Psi'\rangle = \frac{1}{2m}\langle\Phi''|[\mathcal{T}\rho_1(\sigma\pi) + (\sigma\pi)\rho_1\mathcal{T}]|\Phi'\rangle.$$

Следовательно, оператор $\mathcal{T}$ можно заменить проекцией на подпространство больших компонент оператора

$$\frac{1}{2m}[\mathcal{T}\rho_1(\sigma\pi) + (\sigma\pi)\rho_1\mathcal{T}].$$

Так, «скорость» $\boldsymbol{\alpha} = \rho_1\boldsymbol{\sigma}$ можно заменить действующим в пространстве больших компонент оператором

$$\frac{\boldsymbol{\pi}}{m} = \frac{\boldsymbol{\sigma}(\sigma\pi) + (\sigma\pi)\boldsymbol{\sigma}}{2m}.$$

Аналогично плотность потока в точке $\boldsymbol{r}_0$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0) \equiv \rho_1\boldsymbol{\sigma}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$$

можно заменить оператором

$$(\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0))_{\text{п. г.}} \equiv \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\sigma}\left(\frac{\sigma\pi}{2m}\right) + \left(\frac{\sigma\pi}{2m}\right)\boldsymbol{\sigma}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$$

или, используя тождество (XIII. 83),

$$(\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0))_{\text{п. г.}} \equiv \boldsymbol{j}^{(\text{I})} + \boldsymbol{j}^{(\text{II})}, \tag{189}$$

$$\boldsymbol{j}^{(\text{I})} \equiv \frac{\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\pi}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)}{2m}, \tag{190а}$$

$$\boldsymbol{j}^{(\text{II})} \equiv i\frac{\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\sigma}) - (\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{\sigma})\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)}{2m}. \tag{190б}$$

Мы видим, что электрический ток $e\boldsymbol{j}$ теории Дирака в этом приближении представляется суммой из двух слагаемых. Первое, $e\boldsymbol{j}^{(\text{I})}$, совпадает с током теории Шредингера (см. задачу IV. 1). Чтобы найти интерпретацию второго слагаемого, рассмотрим его матричный элемент между Φ' и Φ''

$$\langle\Phi''|e\boldsymbol{j}^{(\text{II})}|\Phi'\rangle = \frac{e}{2m}\operatorname{rot}\langle\Phi''|\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\sigma}|\Phi'\rangle.$$

Это ток, связанный с магнитным моментом, и величину

$$\frac{e}{2m}\langle\Phi''|\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\sigma}|\Phi'\rangle \equiv \langle\Phi''|\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\mu}|\Phi'\rangle$$

можно интерпретировать как плотность магнитного момента. Мы увидим, что дивергенция этого тока обращается в нуль и он не дает вклада в уравнение непрерывности.

§ 30. Приложение: сверхтонкая структура и диполь-дипольная связь

Рассмотрим электрон в электрическом поле атома, которое описывается некоторым электростатическим потенциалом $\varphi(r)$, и исследуем эффект, к которому приводит дополнительное поле, создаваемое магнитным моментом $\boldsymbol{M}$ ядра. Магнитный диполь $\boldsymbol{M}$, расположенный в начале координат, порождает поле, которое можно представить векторным потенциалом,

$$\boldsymbol{A} \equiv \frac{\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{r}}{r^3} = \tag{191}$$

$$\equiv \operatorname{rot}(\boldsymbol{M}/r). \tag{191'}$$

Такое поле ведет к дополнительному слагаемому $-e\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}$ в гамильтониане Дирака.

Для определения влияния этого поля в нерелятивистском приближении можно вычислить нерелятивистский предел оператора $-e\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{A}$, используя метод предыдущего параграфа. Можно также рассмотреть те изменения в гамильтониане Паули (188), к которым приводит наличие $\boldsymbol{M}$. Оба подхода эквивалентны и мы воспользуемся вторым.

Если мы учтем только линейные по $\boldsymbol{M}$ члены, то гамильтониан Паули будет содержать два дополнительных слагаемых

$$I_a = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{p}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}),$$

$$I_b = -\frac{e}{2m}(\sigma\mathcal{H}) = -\mu\mathcal{H},$$

где $\mathcal{H}$ — поле, порожденное диполем $\boldsymbol{M}$.

Слагаемое I_a представляет собой спин-орбитальное взаимодействие (спин ядра и орбита электрона). Поскольку $\operatorname{div}\boldsymbol{A} = 0$ (см. ур. (191)), то

$$I_a = -\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}.$$

Подставляя в правую часть выражение (191) и вспоминая определение орбитального момента электрона $\boldsymbol{L} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$, получаем

$$I_a = -\frac{e\boldsymbol{M}\boldsymbol{L}}{mr^3}. \tag{192}$$

Слагаемое I_b представляет собой спин-спиновое или диполь-дипольное взаимодействие. Вычислим это слагаемое, используя формулу (191),

$$I_b = -\mu(\nabla \times \boldsymbol{A}) = -\mu\left[\nabla \times \left(\nabla \times \frac{\boldsymbol{M}}{r}\right)\right] =$$

$$= (\mu \boldsymbol{M})\,\Delta\left(\frac{1}{r}\right) - [(\mu\nabla)(\boldsymbol{M}\nabla)]\left(\frac{1}{r}\right). \qquad (193)$$

Если $r \neq 0$, то дифференцирование легко выполнить и получить

$$-\frac{3(\boldsymbol{M}r)(\mu r) - (\boldsymbol{M}\mu)r^2}{r^5}.$$

Выражение (193), как функция r, имеет в начале координат особенность порядка $1/r^3$. Чтобы определить действие оператора I_b, применим его к регулярной функции $f(r)$ и проинтегрируем это произведение по малой окрестности точки $r = 0$. Для этого запишем I_b в виде

$$I_b = \frac{2}{3}(\mu \boldsymbol{M})\,\Delta\left(\frac{1}{r}\right) - \left[(\mu\nabla)(\boldsymbol{M}\nabla) - \frac{1}{3}(\mu \boldsymbol{M})\,\Delta\right]\left(\frac{1}{r}\right). \qquad (193')$$

Второй член в этом выражении является тензорным оператором второго порядка в пространстве функций от $\boldsymbol{r}$. Если функцию $f(r)$ разложить по сферическим функциям, то после интегрирования по углам останутся только коэффициенты при сферических функциях второго порядка. Эти коэффициенты обращаются в нуль в начале координат не медленнее, чем r^2 и, следовательно, вклад второго члена в выражение (193), несмотря на сингулярность $1/r^3$, также обращается в нуль в начале координат. Используя тождество (А. 12), первый член можно записать в виде $-(8\pi/3)(\mu \boldsymbol{M})\delta(\boldsymbol{r})$. Таким образом, для любого $\boldsymbol{r}$, включая и начало координат, справедливо равенство

$$I_b = -\frac{8\pi}{3}(\boldsymbol{M}\mu)\,\delta(\boldsymbol{r}) - \frac{1}{r^3}\left[3\left(\boldsymbol{M}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\left(\mu\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) - (\boldsymbol{M}\mu)\right]. \qquad (194)$$

Равенства (192) и (194) получены в нерелятивистском пределе и позволяют определить сверхтонкую структуру атомных уровней с точностью до v^2/c^2. В частности, вклад s-электронов в сверхтонкую структуру дается контактным членом $-(8\pi/3)(\mu \boldsymbol{M})\delta(\boldsymbol{r})$.

§ 31. Поправки высших порядков и преобразование Фолди — Вотхойзена

В низшем порядке по v/c теория Дирака эквивалентна двухкомпонентной теории Паули. Используя, как и ранее, уравнения (182)—(183), можно получить релятивистские поправки выс-

ших порядков. Для этого следует заменить величину $1/M'$ ее разложением по степеням $[(W - e\varphi)/2m]$:

$$\frac{1}{M'} = \frac{1}{m}\left[1 - \frac{W - e\varphi}{2m} + \left(\frac{W - e\varphi}{2m}\right)^2 - \ldots\right].$$

Поскольку

$$\left\langle \frac{W - e\varphi}{2m} \right\rangle \approx \left\langle \frac{\pi^2}{4m^2} \right\rangle \approx O\left(\frac{v^2}{c^2}\right),$$

то это по существу ряд по степеням v^2/c^2. Если в этом разложении ограничиться первым членом, как это было сделано в § 29, то получим теорию Паули. Учитывая последующие члены разложения, найдем релятивистские поправки высших порядков, однако как только мы учтем поправки порядка v^2/c^2, мы потеряем эквивалентность теории Дирака в форме (182)—(183) двухкомпонентной теории. Это происходит потому, что:

(i) нельзя более пренебрегать вкладом малых компонент в нормировку и в матричные элементы четных операторов;

(ii) уравнение (183) не является более уравнением на собственные значения (см. первую сноску к § 29).

Хотя возникающий при этом метод не является совершенно непригодным, его применение и интерпретация результатов становится довольно деликатной проблемой. Фолди и Вотхойзен предложили иной метод, позволяющий находить двухкомпонентную теорию, которая является приближением к теории Дирака в данном порядке по v/c. Основу этого метода составляет подпредставление), гамильтониан Дирака является четным операторов теории Дирака. В новом «представлении», которое мы будем называть представлением Фолди — Вотхойзена, (ФВ-представление), гамильтониан Дирака является четным оператором в данном порядке по v/c, так что в этом приближении малые и большие компоненты полностью разделены в волновом уравнении. Следовательно, малые компоненты можно просто отбросить и получить искомую двухкомпонентную теорию. Операторы этой двухкомпонентной теории получаются из четных операторов ФВ-представления, а не из операторов исходного представления. Таким образом, приходят к новой интерпретации операторов нерелятивистской механики, в частности, более удовлетворительную интерпретацию получает оператор координаты.

В оставшейся части этого раздела мы будем заниматься ФВ-представлением и его применением к нерелятивистскому пределу уравнения Дирака.

§ 32. ФВ-преобразование для свободной частицы

В случае свободной частицы малые и большие компоненты можно полностью разделить во всех порядках v/c.

Рассмотрим гамильтониан Дирака

$$H_0 \equiv \alpha p + \beta m.$$

Пусть Γ_+ и Γ_- — проекторы на решения с положительной и отрицательной энергией соответственно

$$\Gamma_\pm \equiv \frac{1}{2}\left[1 \pm \frac{H_0}{E_p}\right] = \frac{1}{2}\left[1 \pm \frac{\alpha p + \beta m}{E_p}\right], \tag{195}$$

$$E_p \equiv \sqrt{m^2 + p^2}.$$

Пусть B_+ и B_- — проекторы на подпространства больших и малых компонент:

$$B_\pm \equiv \frac{1}{2}(1 \pm \beta).$$

По определению, оператор U, который переводит величины в ФВ-представление, преобразует Γ_+ в B_+, а Γ_- в B_-. Обозначая штрихом векторы и операторы в ФВ-представлении, можно, следовательно, записать, что

$$U^\dagger U = UU^\dagger = 1,$$

$$\Gamma'_\pm \equiv U\Gamma_\pm U^\dagger = B_\pm.$$

Потребуем также, чтобы оператор U был инвариантен относительно трансляций, вращений и отражения. Предоставим читателю доказательство того, что в этом случае U определен с точностью до фазового множителя. Фиксируя эту фазу, получаем

$$U = \sqrt{\frac{2E_p}{m + E_p}}\,\frac{1}{2}\left[1 + \beta\frac{H_0}{E_p}\right] = \tag{196}$$

$$= \sqrt{\frac{m + E_p}{2E_p}} + \beta\frac{\alpha p}{\sqrt{2E_p(m + E_p)}}. \tag{196'}$$

Легко проверить, что данное выражение удовлетворяет всем упомянутым требованиям.

Поскольку оператор U не зависит от времени, гамильтониан H_F, который определяет зависимость от времени векторов состояния в ФВ-представлении, дается равенством

$$H_F = UH_DU^\dagger.$$

Используя выражение (196), получаем

$$H_F = \beta E_p \equiv \beta(m^2 + p^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{197}$$

В силу четности оператора H_F, большие Φ' и малые χ' компоненты расцепились в уравнении движения

$$i\,\partial\Phi'/\partial t = E_p\Phi', \tag{198а}$$

$$i\,\partial\chi'/\partial t = -E_p\chi'. \tag{198б}$$

Если мы ограничимся решениями с положительной энергией (*a fortiori* нерелятивистскими энергиями), то теория Дирака будет эквивалентна во всех порядках v/c двухкомпонентной теории, которая описывается уравнением (198а).

Оператор U коммутирует с $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{J}$ и оператором четности P, но не коммутирует с оператором $\boldsymbol{r}$. В представлении, где оператор $\boldsymbol{r}$ диагонален, U задается интегральным оператором с матричными элементами

$$\langle \boldsymbol{r}\,|U|\,\boldsymbol{r}'\rangle = \iint \langle \boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{p}\rangle\, d\boldsymbol{p}\,\langle \boldsymbol{p}\,|U|\,\boldsymbol{p}'\rangle\, d\boldsymbol{p}'\,\langle \boldsymbol{p}'\,|\boldsymbol{r}'\rangle.$$

Откуда, используя формулу (196′), находим

$$\langle \boldsymbol{r}\,|U|\,\boldsymbol{r}'\rangle = (2\pi)^{-3}\int\left[\sqrt{\frac{m+E_p}{2E_p}} + \beta\frac{\boldsymbol{\alpha p}}{\sqrt{2E_p\,(m+E_p)}}\right] e^{i\boldsymbol{p}\,(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\,d\boldsymbol{p}.$$

Матричный элемент $\langle \boldsymbol{r}|U|\boldsymbol{r}'\rangle$ является функцией $(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, которая практически исчезает при $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \gg 1/m$ и сосредоточена в области, где $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ меньше или порядка $1/m$. Следовательно, ФВ-представление является нелокальным преобразованием, при котором спинор $\Psi'(\boldsymbol{r})$ — преобразование спинора $\Psi(\boldsymbol{r})$ — получается некоторым усреднением значений спинора Ψ по окрестности точки $\boldsymbol{r}$, и линейные размеры этой окрестности имеют порядок $1/m$ — длины комптоновской волны частицы.

Оператор координаты частицы определяется в ФВ-представлении равенством

$$\boldsymbol{r}' \equiv U\boldsymbol{r}U^{\dagger}.$$

Этот оператор отличен от $\boldsymbol{r}$. Следуя Фолди и Вотхойзену, мы будем называть величину, которая задается оператором $\boldsymbol{r}$ в ФВ-представлении, *усредненной координатой*. В исходном представлении она задается некоторым оператором $\boldsymbol{R}$, и, поскольку $\boldsymbol{R}' \equiv \boldsymbol{r}$, имеем

$$\boldsymbol{R} \equiv U^{\dagger}\boldsymbol{r}U.$$

В представлении Дирака $\boldsymbol{R}$ является нелокальным оператором. Действие этого оператора на спинор $\Psi(\boldsymbol{r})$ состоит, грубо говоря, в умножении на $\boldsymbol{r}$ и замене значения в каждой точке на некоторое усредненное значение спинора по области порядка $1/m$ с центром в этой точке. Это объясняет приведенное выше название усредненной координаты.

Если Q' — четный оператор в ФВ-представлении, то в двухкомпонентной теории ему соответствует наблюдаемая $Q_{\text{п. г.}}$, которая получается, если в Q' оставить только матричные элементы между векторами из подпространства больших компонент: $Q_{\text{п.г.}} \equiv B_+ Q' B_+$. В частности, наблюдаемая $\boldsymbol{r}$, соответствующая координате в двухкомпонентной теории, отвечает «средней координате» $\boldsymbol{R}$, а не оператору координаты собственно теории Дирака [1]).

§ 33. ФВ-преобразование для частицы во внешнем поле

В присутствии внешнего поля гамильтониан Дирака имеет вид

$$H = \beta m + \mathscr{T} + \mathscr{P}, \quad \mathscr{T} \equiv \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}), \quad \mathscr{P} \equiv e\varphi.$$

Вообще говоря, не существует «представления», в котором гамильтониан был бы в точности «четным» оператором. Однако применяя последовательно унитарные преобразования, можно получить «представления», в которых «нечетная» часть соответствующего гамильтониана имеет все более высокий порядок по v/c. Для доказательства рассмотрим унитарный оператор

$$U = \exp(\beta\mathscr{T}/2m).$$

Гамильтониан H_1, который определяет зависимость от времени в новом представлении, дается равенством

$$H_1 = UHU^\dagger - iU\,\partial U^\dagger/\partial t.$$

Используя тот факт, что $\beta\mathscr{T}$ антикоммутирует с $(\beta m + \mathscr{T})$, а $U^\dagger = \exp(-\beta\mathscr{T}/2m)$, получаем

$$U(\beta m + \mathscr{T})U^\dagger = U^2(\beta m + \mathscr{T}) =$$
$$= \beta m[\cos(\mathscr{T}/m) + (\mathscr{T}/m)\sin(\mathscr{T}/m)] +$$
$$+ m[(\mathscr{T}/m)\cos(\mathscr{T}/m) - \sin(\mathscr{T}/m)].$$

Члены $U\mathscr{P}U^\dagger$ и $-iU\partial U^\dagger/\partial t$ можно представить в виде рядов по степеням $\mathscr{T}/m$, используя следующее операторное тожде-

---

[1]) В соответствии с данной здесь интерпретацией орбитальный момент $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ и спин $\boldsymbol{\sigma}$ двухкомпонентной теории соответствуют не орбитальному моменту и спину теории Дирака, а «усредненному моменту импульса» $\mathbf{R}\times\boldsymbol{p}$ и усредненному спину $\boldsymbol{\Sigma}$. Здесь $\boldsymbol{\Sigma}$ — оператор, которому в ФВ-представлении отвечает оператор $\boldsymbol{\sigma}$; $\boldsymbol{\Sigma}' \equiv \boldsymbol{\sigma}$. Читатель может убедиться в том, что каждая из компонент среднего спина и среднего момента импульса коммутирует с гамильтонианом свободной частицы, собственно спин и орбитальный момент этим свойством не обладают. Отметим также, что

$$\boldsymbol{J} \equiv (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{p}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}.$$

ство, которое справедливо для любых двух операторов A и B (см. задачу VIII. 4):

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \\ + \frac{1}{2}[A, [A, B]] + \ldots + \frac{1}{n!}\overbrace{[A, [A, \ldots [A, [A, B]] \ldots]]}^{n \text{ скобок}} + \ldots$$

Мы приведем только результат вычисления H' в случае, когда $\mathcal{T}$ не зависит от времени. В первом приближении справедливо равенство $H' = H_1$. Находим

$$H_1 = \beta m + \mathcal{P}_1 + \mathcal{T}_1,$$

$$\mathcal{P}_1 = \mathcal{P} + \beta \frac{\mathcal{T}^2}{2m} - \frac{1}{8} m \left[\frac{\mathcal{T}}{m}, \left[\frac{\mathcal{T}}{m}, \frac{\mathcal{P}}{m}\right]\right] - \frac{1}{8} \beta m \left(\frac{\mathcal{T}}{m}\right)^4 + \ldots,$$

$$\mathcal{T}_1 = m\left(\frac{1}{2}\beta\left[\frac{\mathcal{T}}{m}, \frac{\mathcal{P}}{m}\right] - \frac{1}{3}\left(\frac{\mathcal{T}}{m}\right)^3\right) + \ldots$$

Эти разложения для «четной» и «нечетной» частей оператора H_1 определяют $\mathcal{P}_1$ с точностью до $(\mathcal{T}/m)^6$ или $(\mathcal{P}/m)(\mathcal{T}/m)^4$ и $\mathcal{T}_1$ — с точностью до $(\mathcal{T}/m)^5$ или $(\mathcal{P}/m)(\mathcal{T}/m)^3$, в зависимости от того какая из этих величин больше. Следовательно, «нечетная» часть гамильтониана H_1 меньше «нечетной» части H на множитель порядка $\mathcal{P}/m$ или $(\mathcal{T}/m)^2$. В нерелятивистском пределе величины $\mathcal{P}/m$ и $\mathcal{T}/m$ имеют порядок $(v/c)^2$ и v/c соответственно. Таким образом, $\mathcal{T}_1$ имеет порядок $(v/c)^3$.

Для оператора H_1 повторим ту же операцию, что была сделана для H, т. е. совершим унитарное преобразование с оператором

$$U_1 = \exp(\beta \mathcal{T}_1/2m),$$

и новый гамильтониан обозначим H_2. «Нечетная» часть этого гамильтониана меньше $\mathcal{T}_1$ на множитель порядка $\mathcal{P}_1/m$ или $(\mathcal{T}_1/m)^2$. В нерелятивистском пределе $\mathcal{P}_1/m$ имеет порядок $(v/c)^2$, а $(\mathcal{T}_1/m)^2$ — порядок $(v/c)^6$, следовательно, $\mathcal{T}_2$ имеет порядок $(v/c)^5$. Если пренебречь членами такого порядка, то гамильтониан H_2 будет «четным» оператором, который имеет вид

$$H_2 \approx \beta m + \mathcal{P}_1 + O(v^5) \approx$$

$$\approx \beta m + \mathcal{P} + \beta \frac{\mathcal{T}^2}{2m} - \frac{1}{8} m \left[\frac{\mathcal{T}}{m}, \left[\frac{\mathcal{T}}{m}, \frac{\mathcal{P}}{m}\right]\right] - \frac{1}{8} \beta m \left(\frac{\mathcal{T}}{m}\right)^4 + O(v^5) \approx$$

$$\approx \beta m + e\varphi + \frac{1}{2m}\beta(\sigma\pi)^2 - \frac{1}{8m^2}[(\sigma\pi), [(\sigma\pi), \varphi]] - \frac{1}{8m^3}\beta(\sigma\pi)^4 + O(v^5).$$

Аналогично, если пренебречь членами порядка $(v/c)^3$, то H_2 также является «четным» оператором и имеет вид

$$H_1 \approx \beta m + e\varphi + \frac{1}{2m}\beta(\sigma\pi)^2 + O(v^3).$$

После этих преобразований мы можем перейти к двухкомпонентной теории, так же как и в случае свободной частицы. С точностью до $(v/c)^5$ решения с положительной энергией задаются волновыми функциями Φ' из пространства больших компонент, которые удовлетворяют уравнению

$$i\,\partial\Phi'/\partial t = (m + H'_{\text{п. г.}})\,\Phi'.$$

Здесь $(m + H'_{\text{п. г.}})$ — проекция приведенного выше приближенного выражения для H_2 на пространство больших компонент, т. е.

$$H'_{\text{п. г.}} = e\varphi + \frac{1}{2m}(\sigma\pi)^2 - \frac{e}{8m^2}[(\sigma\pi), [(\sigma\pi), \varphi]] - \frac{1}{8m^3}(\sigma\pi)^4. \quad (199)$$

Два первых слагаемых представляют собой гамильтониан теории Паули, следующие два слагаемых — релятивистские поправки порядка $(v/c)^2$ к нерелятивистской энергии $H_{\text{п.г.}}$.

Несложные вычисления приводят нас к равенствам

$$(\sigma\pi)^4 = (\pi^2 - e(\sigma\mathcal{H}))^2, \quad (200)$$

$$[(\sigma\pi), [(\sigma\pi), \varphi]] = \operatorname{div}\mathcal{E} + 2\sigma(\mathcal{E}\times\pi), \quad (201)$$

которые позволяют записать $H'_{\text{п г.}}$ в более привычной форме.

Производя последовательно такие унитарные преобразования достаточное число раз, можно построить двухкомпонентную теорию, которая определяет состояния с положительной энергией с точностью до любого заданного порядка по v/c. Каждое новое преобразование увеличивает точность на множитель $(v/c)^2$. Исследование сходимости получившихся рядов является довольно деликатным вопросом. Весьма вероятно, что в большинстве случаев мы имеем лишь асимптотическое разложение. Это разложение по степеням операторов $\boldsymbol{p}/m$, т. е. $(\hbar/mc)\,\mathrm{grad}$, и $\partial/m\partial t$, т. е. $(\hbar/mc^2)\,\partial/\partial t$. А следовательно, скорость сходимости этого ряда зависит от характера изменения потенциала $(\boldsymbol{A}, \varphi)$ на расстояниях порядка $\hbar/mc$ (и за время порядка $\hbar/mc^2$ — отношение комптоновской длины волны к скорости света).

§ 34. Электрон в центральном электростатистическом потенциале

В качестве приложения описанной в предыдущем параграфе техники рассмотрим электрон в центральном электростатическом потенциале $V(r) \equiv e\varphi(r)$. В этом случае $\boldsymbol{A}(r) = 0$ и гамильтониан Паули совпадает с гамильтонианом теории Шредингера

$$H_{\text{п. г.}} = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

Если учесть поправки порядка v^2/c^2, то к гамильтониану $H_{\text{п.г.}}$ добавятся два последних слагаемых выражения (199). В данном случае

$$e\mathscr{E} = -\operatorname{grad} V = -\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{dV}{dr},$$

$$e \operatorname{div} \mathscr{E} = -\Delta V,$$

и принимая во внимание соотношения (200) и (201), получаем

$$H'_{\text{п. г.}} = H_{\text{п. г.}} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\boldsymbol{\sigma L}) + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V. \quad (202)$$

Первое дополнительное слагаемое, $-p^4/8m^3c^2$, представляет собой релятивистскую поправку к кинетической энергии $p^2/2m$, следующее — спин-орбитальное взаимодействие (см. формулу (XIII. 95)). Третье слагаемое, $\hbar^2\Delta V/8m^2c^2$, определяет поправку к центральному потенциалу, которая называется поправкой Дарвина; в случае чисто кулоновского потенциала $V(r) = -Ze^2/r$. Эта поправка имеет вид

$$(\pi Ze^2\hbar^2/2m^2c^2)\,\delta(\boldsymbol{r})$$

и влияет только на s-состояния.

§ 35. Обсуждения и выводы

Независимо от того, имеется ли внешнее поле или оно равно нулю, операторы двухкомпонентной нерелятивистской теории представляют собой проекции операторов представления Фолди — Вотхойзена на пространство больших компонент. В частности, оператор нерелятивистской теории $\boldsymbol{r}$ следует отождествить с оператором $\boldsymbol{R}$, который мы назвали «усредненной координатой». В теории Дирака взаимодействие частицы с электромагнитным потенциалом локально, другими словами, частицы взаимодействуют с электромагнитным потенциалом в точке $\boldsymbol{r}$. При переходе к ФВ-представлению, где $\boldsymbol{r}$ представляет усредненную координату, взаимодействие становится нелокальным и оно зависит от значений электромагнитного потенциала в области с линейными размерами порядка $\hbar/mc$, содержащий точку $\boldsymbol{r}$. Если изменение потенциала в этой области незначительное, то это взаимодействие можно представить посредством ряда Тейлора, включающим в себя значения потенциала и его производных в точке $\boldsymbol{r}$. Так, гамильтониан $H'_{\text{п. г.}}$ (ур. (199) или (202)) содержит первые члены этого разложения.

Следовательно, в нерелятивистском пределе электрон представляет собой не точечный заряд, а распределение заряда и тока в области с линейными размерами $\hbar/mc$. Это объясняет появление членов взаимодействия, которые связаны с магнитным

моментом (взаимодействие $-\mu\mathcal{H}$, спин-орбитальное взаимодействие) и распределенной плотностью заряда (дарвиновское слагаемое).

Наконец, следует отметить, что использование нерелятивистского приближения для потенциалов, которые сингулярны в начале координат, таких как $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M} \times \boldsymbol{r}/r^3$ или $\varphi = -Ze/r$, не обосновано, поскольку в окрестности точки $r = 0$ изменение величин $e\boldsymbol{A}/m$ и $e\varphi/m$ не мало. Если воспользоваться описанным выше методом последовательных приближений достаточное число раз, то в нерелятивистском гамильтониане появятся слагаемые, которые будут иметь достаточно сильную сингулярность в начале координат и будут давать бесконечный вклад в энергию. Пути преодоления этой трудности уже были предложены в предыдущих обсуждениях. В нерелятивистском гамильтониане величины $\boldsymbol{A}$ и φ заменяются их средними значениями по области с линейными размерами порядка $\hbar/mc$. Если нерелятивистское приближение является обоснованным, то это ведет к эффективному обрезанию сингулярностей на расстоянии $\hbar/mc$ от начала координат во всех сингулярных выражениях, которые возникают при вычислениях. Для того чтобы нерелятивистское приближение было обоснованным в упомянутых выше двух случаях, достаточно чтобы в точке $r = \hbar/mc$ выполнялись неравенства [1])

$$e|\boldsymbol{A}| \ll mc^2, \quad e\varphi \ll mc^2.$$

Раздел VI. РЕШЕНИЯ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИЕЙ И ТЕОРИЯ ПОЗИТРОНОВ

Θαλασσα!θαλασσα! *)
(*Анабасис*, IV. 8)

§ 36. Свойства зарядово-сопряженных решений

В дальнейшем мы будем использовать понятие зарядового сопряжения, которое было введено в § 19. Зарядовое сопряжение представляет собой антилинейное взаимнооднозначное соответствие между волновыми функциями, которые описывают поведение двух различных частиц с одной и той же массой m, но с противоположными зарядами $+e$ и $-e$ в заданном электромагнитном поле $(\boldsymbol{A}, \varphi)$.

Если физическая величина, связанная с первой частицей, представлена наблюдаемой $Q(e)$, то для второй частицы та же

[1]) Если m_N — масса атомного ядра, то $|\boldsymbol{M}| \approx Ze\hbar/m_N c$; величина $e\boldsymbol{A}/mc^2$ в точке $r = \hbar/mc$ имеет порядок $(e^2/\hbar c)(Zm/m_N)$, т. е. 10^{-5}—10^{-6}. Таким образом, наши вычисления сверхтонкой структуры полностью обоснованы. Что касается примера из § 34, то величина $e\varphi/mc^2$ имеет порядок $e^2Z/\hbar c$ и вычисления являются обоснованными, если $Z \ll 137$.

*) *Море! Море!* (*греч., прим. перев.*).

самая величина представляется наблюдаемой $Q(-e)$. Так, в обоих случаях для импульса имеем $\boldsymbol{p} \equiv -i\nabla$, а для оператора энергии в первом случае имеем

$$H(e) \equiv \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) + \beta m + e\varphi,$$

а во втором случае

$$H(-e) \equiv \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) + \beta m - e\varphi.$$

Рассмотрим решение $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ и зарядово-сопряженное решение $\Psi^C(\boldsymbol{r}, t)$. Мы хотим сравнить физические характеристики состояний, которые описываются этими решениями. Если K_C — антилинейный оператор, определенный равенством (124), то

$$\Psi^C = K_C\Psi. \tag{203}$$

Пусть $\langle Q\rangle$ обозначает среднее значение Q в состоянии Ψ, а $\langle Q\rangle_C$ — среднее значение того же оператора в состоянии Ψ^C. Предполагая, что состояния Ψ и Ψ^C нормированы на единицу, имеем

$$\langle Q\rangle = \langle\Psi\,|\,Q\,|\,\Psi\rangle,$$
$$\langle Q\rangle_C = \langle\Psi^C\,|\,Q\,|\,\Psi^C\rangle.$$

Из соотношения (203) получаем

$$\langle Q\rangle_C = \left(\langle\Psi\,|\,K_C^\dagger\right)\left(QK_C\,|\,\Psi\rangle\right) =$$
$$= \langle\Psi\,|\,(K_C^\dagger QK_C)\,|\,\Psi\rangle^* = \langle\Psi\,|\,(K_C^\dagger Q^\dagger K_C)\,|\,\Psi\rangle,$$

откуда следует соотношение для средних значений

$$\langle Q\rangle_C = \langle(K_C^\dagger Q^\dagger K_C)\rangle. \tag{204}$$

Используя это соотношение и свойства антиунитарного преобразования K_C, находим следующие соотношения для средних значений в состоянии Ψ и в зарядово-сопряженном состоянии:

$$\begin{gathered}
\langle\beta\rangle_C = -\langle\beta\rangle, \qquad \langle\boldsymbol{\alpha}\rangle_C = \langle\boldsymbol{\alpha}\rangle, \qquad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle, \\
\langle\boldsymbol{r}\rangle_C = \langle\boldsymbol{r}\rangle, \qquad \langle\boldsymbol{p}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{p}\rangle, \qquad \langle\boldsymbol{L}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{L}\rangle, \\
\langle P(\boldsymbol{r}_0)\rangle_C = \langle P(\boldsymbol{r}_0)\rangle, \quad \langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)\rangle_C = \langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)\rangle, \quad \langle\boldsymbol{J}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{J}\rangle, \\
\langle H(-e)\rangle_C = -\langle H(e)\rangle.
\end{gathered} \tag{205}$$

Мы видим, что зарядово-сопряженные решения *имеют совпадающие плотности вероятности и плотности потока*, — таким образом, противоположные плотности зарядов и электрических токов — *но противоположные по знаку энергии*: зарядовое сопряжение меняет знак энергии.

§ 37. Особое поведение решений с отрицательной энергией

После этих предварительных замечаний мы можем перейти к более подробному обсуждению вопроса о состояниях с отрицательной энергией.

Вначале рассмотрим случай свободной частицы. Решения уравнения Дирака в этом случае были получены в § 23. Спектр энергии состоит из двух полупрямых $(-\infty, -mc^2)$ и $(mc^2, +\infty)$, разделенных интервалом длиной $2mc^2$ (см. рис. 22, *а*). Первая часть спектра отвечает состояниям с отрицательной энергией: $E = -E_p = -\sqrt{m^2 + p^2}$, а вторая часть — состояниям с положительной энергией.

Исследуем движение свободного волнового пакета. Мы покажем, что, вообще говоря, центр волнового пакета только в среднем движется по классической траектории. Для этого проинтегрируем уравнения движения в представлении Гейзенберга, которые в данном случае имеют вид

$$d\boldsymbol{r}/dt = i[H, \boldsymbol{r}] = \boldsymbol{\alpha}, \tag{206}$$

$$d\boldsymbol{\alpha}/dt = i[H, \boldsymbol{\alpha}] = i(H\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}H) - 2i\boldsymbol{\alpha}H = 2i\boldsymbol{p} - 2i\boldsymbol{\alpha}H. \tag{207}$$

Поскольку $\boldsymbol{p}$ и H не зависят от времени, уравнение (207) легко интегрируется

$$\boldsymbol{\alpha}(t) = \left(\boldsymbol{\alpha}(0) - \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right) e^{-2iHt} + \frac{\boldsymbol{p}}{H}.$$

Таким образом, получена явная зависимость $d\boldsymbol{r}/dt$ от времени t, и уравнение (206) тоже легко интегрируется

$$\boldsymbol{r}(t) = \boldsymbol{r}(0) + \frac{\boldsymbol{p}}{H}t + i\left(\boldsymbol{\alpha}(0) - \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{e^{-2iHt}}{2H}. \tag{208}$$

Формула (208) определяет оператор $\boldsymbol{r}$ в представлении Гейзенберга в момент времени t как функцию от значений, которые принимают операторы $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{\alpha}$ в начальный момент времени $t=0$. Отсюда мы можем получить закон движения центра $\langle \boldsymbol{r} \rangle$ любого волнового пакета, который поучительно сравнить с классическим законом

$$\boldsymbol{r}_{\text{кл.}}(t) = \boldsymbol{r}(0)_{\text{кл.}} + \left(\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)_{\text{кл.}} t.$$

В отличие от классического равномерного прямолинейного движения свободный волновой пакет испытывает сложное движение — результат сложения равномерного прямолинейного движения со скоростью $\langle \boldsymbol{p}/H \rangle$ и быстрых осцилляций

$$\left\langle i\left(\boldsymbol{\alpha}(0) - \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{e^{-2iHt}}{2H}\right\rangle.$$

Амплитуда и период этих осцилляций («Zitterbewegung» — дрожание) имеют порядок $\hbar/2mc$ и $\hbar/2mc^2$ соответственно.

Таких осцилляций не возникает, если пакет представляет собой суперпозицию волн только с положительной энергией или только с отрицательной. Чтобы убедиться в этом, достаточно показать, что

$$\Gamma_{\pm}\left(\boldsymbol{\alpha}-\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{e^{-2iHt}}{2H}\Gamma_{\pm}=0,$$

где Γ_+ и Γ_- — проекторы на состояния с положительной и отрицательной энергией соответственно (определение (195)). Последовательно находим

$$[H,\ \boldsymbol{\alpha}]=2\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{\alpha}H,$$

$$[\Gamma_{\pm},\ \boldsymbol{\alpha}]=\pm\frac{\boldsymbol{p}}{E_p}\mp\boldsymbol{\alpha}\frac{H}{E_p}.$$

И, поскольку $H\Gamma_{\pm}=\pm E_p\Gamma_{\pm}$, то получаем

$$0\equiv\Gamma_{\pm}[\Gamma_{\pm},\ \boldsymbol{\alpha}]\Gamma_{\pm}=\Gamma_{\pm}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{H}-\boldsymbol{\alpha}\right)\Gamma_{\pm}.$$

Откуда мы получаем упомянутое выше свойство, используя дополнительно коммутативность H и Γ_+, Γ_-. Следовательно, быстрые осцилляции связаны с интерференцией компонент волнового пакета с положительной и отрицательной энергией.

Собственно «дрожание», являясь любопытным эффектом, не представляет какой-либо трудности для теории. Трудность возникает, когда исследуется движение волнового пакета, построенного только из состояний с отрицательной энергией. В этом случае «дрожание» исчезает и центр пакета движется равномерно и прямолинейно со скоростью

$$\boldsymbol{v}=\left\langle\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right\rangle=-\left\langle\frac{\boldsymbol{p}}{E_p}\right\rangle,$$

которая противоположна по направлению импульсу пакета $\langle\boldsymbol{p}\rangle$. В частности, в нерелятивистском пределе ($H\approx-mc^2$) получаем соотношение $\boldsymbol{v}=-\langle\boldsymbol{p}\rangle/m$, т. е. частица ведет себя так, как если бы она имела отрицательную массу.

Трудность такого рода становится еще более очевидной при исследовании движения волнового пакета в статическом поле.

Рассмотрим, например, электрон в кулоновском потенциале притяжения $-Ze^2/r$. Спектр состоит из непрерывной части положительных энергий от mc^2 до ∞, серии дискретных уровней положительных энергий, меньших mc^2, и непрерывной части отрицательных энергий от $-mc^2$ до $-\infty$ (см. рис. 22, *б*). Напомним, что состояния с отрицательной энергией соответствуют при зарядовом сопряжении состояниям частицы с той же мас-

сой, но с противоположным зарядом (т. е. состоянием позитрона), которая находится в том же потенциале. Можно сказать и иначе, что состояния с отрицательной энергией соответствуют состояниям электрона в потенциале Ze^2/r. При этом соответствии меняет знак энергия и переставляются большие и малые компоненты, а плотность потока и плотность остаются теми же (см. ур. (205)). Спектр электрона в потенциале отталкивания

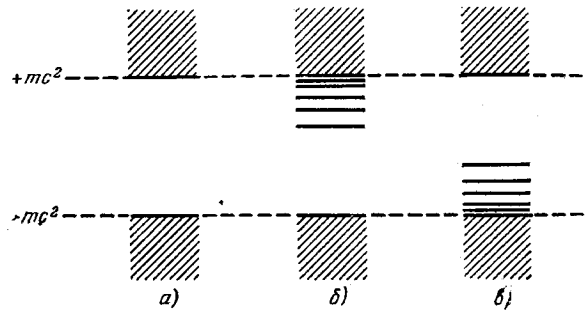


Рис. 22. Спектр энергий электрона Дирака: *а*) свободного; *б*) в потенциале притяжения — Ze^2/r; *в*) в потенциале отталкивания Ze^2/r.

Ze^2/r изображен на рис. 22, *в*. Непрерывная часть положительных энергий в потенциале отталкивания соответствует непрерывной части отрицательных энергий в потенциале притяжения.

Рассмотрим движение волнового пакета из состояний с отрицательной энергией в потенциале $-Ze^2/r$, предполагая, что справедливо нерелятивистское приближение ($Ze^2 \ll 1$, энергии порядка $-mc^2$). Движение будет тем же, что и для пакета волн с положительной энергией, получающегося зарядовым сопряжением. В пределе очень малых скоростей можно использовать классическое приближение (см. § VI. 5), и движение центра пакета будет почти совпадать с движением классического электрона, т. е. с движением частицы отрицательной массы $-m$ в потенциале $-Ze^2/r$. Направление скорости противоположно импульсу, а направление ускорения противоположно направлению силы. Такие явления никогда не наблюдались в экспериментах.

§ 38. Изменение интерпретации состояний с отрицательной энергией. Теория дырок и позитронов

В приведенной выше формулировке состояния с отрицательной энергией не имеют никакого физического смысла. Если бы было возможно полностью устранить взаимодействие между со-

стояниями с положительной и отрицательной энергией, то последние можно было совсем не учитывать. Однако поступить так не удается.

Рассмотрим, например, свободный электрон в состоянии с положительной энергией E_+ и подвергнем его в течение времени от 0 до t действию электромагнитного излучения частоты ω. Если интервал времени достаточно велик, а напряженность поля не слишком большая, то вычислить результирующий эффект можно, используя методы § XVII. 6. Таким образом, мы получим отличную от нуля вероятность перехода электрона в состояния с энергией $E_+ + \hbar\omega$ и $E_+ - \hbar\omega$. В частности, если $\hbar\omega > (E_+ + mc^2)$, то второй переход совершается в состояния с отрицательной энергией.

В качестве другого примера рассмотрим полный спектр атома водорода (рис. 22, *б*). В результате взаимодействия электрона с электромагнитным полем всегда существует вероятность радиационного перехода из данного состояния атома в состояние с более низкой энергией. Следовательно, электрон, который находится в одном из связанных состояний атома водорода, даже в случае изолированной системы, может совершить квантовый переход в состояния с отрицательной энергией, излучив один или несколько фотонов. Более того, поскольку спектр энергий не ограничен снизу, атом водорода не имеет устойчивых состояний [1]).

Чтобы обойти эти трудности, Дирак сделал следующее предположение. В состоянии, которое мы называем «вакуумом», все состояния отрицательной энергии заняты электронами. Если к такому «вакууму» добавить один электрон, то, поскольку все состояния отрицательной энергии заняты, а электроны подчиняются статистике Ферми — Дирака, этот электрон может находиться только в состояниях с положительной энергией.

Таким образом, «вакуум» представляет собой полностью вырожденный ферми-газ бесконечной плотности. Кроме этого, предполагается, что этот газ совершенно ненаблюдаем и не приводит к каким-либо гравитационным или электромагнитным эффектам. Наблюдаемые физические характеристики данного состояния будут определяться отклонениями этого состояния от такого «вакуума». Так, наблюдаемый заряд системы (электрон + «вакуум») равен разности полных зарядов системы и «вакуума», т. е. заряду электрона. Точно так же наблюдаемая энергия системы равна разности полных энергий системы и «вакуума» и, следовательно, — энергии добавленного электрона.

[1]) О. Клейн сформулировал знаменитый парадокс, из которого также видно, что вероятность перехода в состояния с отрицательной энергией не равна нулю. Парадокс Клейна излагается во многих книгах, см., например, *М. Борн*, *loc. cit.* (прим. 2, гл. I).

Тем самым, переопределение наблюдаемых величин до сих пор сводилось к тому, что оказались запрещенными переходы в состояния с отрицательными энергиями [1]).

Рассмотрим теперь, что будет наблюдаться, если из «моря» отрицательных энергий удалить электрон. Согласно сформулированным выше правилам можно заключить, что возникшая «дырка» будет иметь заряд, противоположный заряду электрона. Кроме этого, ее энергия будет иметь противоположный знак, т. е. будет положительной, а импульс — противоположное направление. Эти утверждения справедливы независимо от того, находится или нет удаленный электрон в собственном состоянии гамильтониана. В частности, если этот электрон описывается волновым пакетом, движущимся со скоростью v, то дырка движется с той же скоростью, но с противоположным импульсом: дырка ведет себя, как частица положительной массы $+m$ и заряда $-e$. Такие частицы наблюдаются в природе, их называют *позитронами*.

Под действием электромагнитного поля или других подходящих возмущений электрон из «моря» отрицательных энергий может совершить квантовый переход в состояние с положительной энергией. Дырка в «море» отрицательных энергий будет вести себя, как позитрон. Таким образом, появляется пара частиц с противоположными зарядами. Рождение электрон-позитронных пар наблюдается экспериментально.

Точно так же, если в море отрицательных энергий имеется дырка, то электрон с положительной энергией может совершить переход в незанятое состояние с отрицательной энергией с испусканием фотонов. Такое явление аннигиляции электрон-позитронных пар с излучением фотонов также наблюдается экспериментально.

§ 39. Трудности теории дырок

Теория дырок, которая была кратко сформулирована выше, позволяет примирить теорию Дирака с такими экспериментальными фактами, как отсутствие состояний с отрицательными энергиями, существование позитронов, рождение и аннигиляция пар. В этом отношении она представляет собой значительный шаг вперед, однако в ней встречаются серьезные трудности и ограничения.

Прежде всего, теория не является полной. Постулируя занятость всех состояний с отрицательной энергией, мы уже *не имеем одночастичной теории* даже при описании одного электрона. Построенный в этой главе формализм теории Дирака

[1]) В частности, автоматически исчезает осцилляторное движение («Zitterbewegung»).

для одной частицы недостаточен для описания такой ситуации, и можно надеяться получить самосогласованное описание только в рамках теории поля.

Теория дырок представляет собой лишь первый шаг в построении корректной теории квантового электронного поля. Ее преимущество состоит в том, что она рисует нам простые картины физических явлений и служит, таким образом, подспорьем при разработке последовательной теории. Однако как только мы пожелаем извлечь из нее нечто большее, нас встречают ловушки и противоречия.

Например, непоследовательно считать, что «вакуум» содержит бесконечное число электронов, и предполагать, что эти электроны не взаимодействуют между собой.

Другим слабым местом теории является явная несимметрия между электронами и позитронами. Можно сформулировать зарядово-сопряженную теорию, в которой позитроны будут играть роль частиц, а электроны — роль дырок, все физические следствия при этом не изменятся. Устранить все эти трудности можно в формализме теории поля, который использует уравнения, инвариантные относительно зарядового сопряжения.

Отметим, наконец, что даже определение состояний отрицательной энергии зависит от приложенного электромагнитного потенциала. В двух случаях, рассмотренных в § 37, свободной частицы и частицы в кулоновском поле, пространства состояний отрицательной энергии не совпадают. Если, например, волновую функцию основного состояния атома водорода разложить по плоским волнам, то плоские волны с отрицательной энергией дадут в это разложение хотя и малый, но не исчезающий вклад. В приведенном выше определении «вакуума», под состояниями с отрицательной энергией понимались состояния свободной частицы (действительно, вакуум естественно определять в отсутствие внешнего поля). Введение электромагнитного поля модифицирует вакуумное состояние за счет рождения пар. В результате возникает нечто вроде поляризуемой среды и величина электрического заряда в «вакууме» кажется меньше своего настоящего значения. Такие же эффекты возникают и в теории поля. Теория дырок позволяет предсказать эти эффекты, однако не в состоянии дать надежного и самосогласованного метода вычисления этих эффектов.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Показать, что если Ψ удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона с потенциалом A^μ, то уравнению непрерывности удовлетворяет следующий 4-ток:

$$j^\mu = \frac{i}{2m}[\Psi^*(D^\mu\Psi) - \Psi(D^\mu\Psi)^*] = \frac{i}{2m}[\Psi^*(\partial^\mu\Psi) - \Psi(\partial^\mu\Psi^*)] - \frac{e}{m}A^\mu\Psi^*\Psi$$

(см. задачу IV. 1).

2. Рассмотрим атом водорода, в котором электрон заменен частицей с теми же массой и зарядом, но волновая функция которой удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона. Тогда уровни дискретного спектра определяются уравнением на собственные значения

$$\left[-\Delta + m^2 - \left(E + \frac{e^2}{r}\right)^2\right] \Psi(r) = 0.$$

Показать, что это уравнение можно решить точно, разделяя угловые и радиальную переменные, и что зависимость уровней дискретного спектра от квантовых чисел n и l дается формулой

$$E^{nl} = m\left(1 + \frac{e^4}{(n-\varepsilon_l)^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \qquad \varepsilon_l = l + \frac{1}{2} - \left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - e^4\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$(n = 1, 2, \ldots, \infty;\ l = 0, 1, \ldots, n-1).$$

Сравнить этот спектр с тем, который получается в нерелятивистской теории Шредингера.

3. Показать, что все приведенные в табл. II (§ 10) матрицы γ^4 (не обязательно унитарные) имеют определитель, равный 1.

4. Пусть B — определенная в конце § 10 матрица. Доказать, что $BB^* = B^*B = -I$. (Показать сначала, что

(i) матрица BB^* кратна единичной и, следовательно, $BB^* = B^*B = \pm I$;

(ii) матрица BB^* не зависит от выбора 4 унитарных матриц γ^μ, которые участвуют в определении B.)

5. Вывести следующие свойства (антиунитарного) оператора зарядового сопряжения K_C, введенного в § 19:

$$K_C p_\mu K_C^+ = -p_\mu, \qquad K_C J_{\alpha\beta} K_C^+ = -J_{\alpha\beta}$$

$$K_C P K_C^+ = -P, \qquad K_C K_T K_C^+ = -K_T.$$

Показать, что, если выбрать фазы операторов преобразования так, как это сделано в § 17, то K_C коммутирует с операторами трансляций и собственных преобразований Лоренца и антикоммутирует с пространственным отражением и обращением времени. Как следует изменить выбор фаз, чтобы K_C коммутировал со всеми операторами этих преобразований?

6. Используя гамильтониан Дирака, получить уравнения движения для операторов $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{\pi}$ в гейзенберговском представлении. Аналогичным образом вывести уравнения

$$\frac{d}{dt}\left[(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\pi}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right] = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}, \qquad \frac{d\boldsymbol{M}}{dt} = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{F}) \equiv e(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\mathcal{E}}),$$

где $\boldsymbol{F}$ — «сила Лоренца»: $\boldsymbol{F} \equiv e(\boldsymbol{\mathcal{E}} + \boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{\mathcal{H}})$. Сравнить эти уравнения с уравнениями (22) и (21′) классической динамики.

7. В случае свободного уравнения Дирака любое его решение удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона. Показать, что обратное не верно (привести контрпример).

8. Доказать тождества (169).

9. Разложить плосковолновое решение уравнения Дирака с импульсом p, направленным по оси z, по сферическим волнам.

10. Провести систематическое исследование таких волновых функций атома водорода, для которых радиальные функции F и G пропорциональны друг другу. Показать, что соответствующие уровни отвечают $n' = 0$ $\left(\text{следовательно, } J = n - \frac{1}{2}\right)$ и $l = n - 1$. Ответ (обозначения § 27):

$$E_{n,\, n-\frac{1}{2}} = m\left(1 - \frac{e^4}{n^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$F = \text{const} \cdot \rho^s e^{-\rho}, \quad G = -\nu F,$$

$$s = \sqrt{n^2 - e^4}, \quad \varkappa = me^2/n, \quad \rho = \varkappa r, \quad \nu = \varkappa/(E + m) \approx e^2/2n.$$

11. Используя предложенный в § 27 метод, вычислить уровни атома водорода в теории Дирака.

12. Сравнить тонкую структуру уровней атома водорода, которая получается в теории Дирака и в теории Клейна — Гордона для частицы с одной и той же массой и зарядом в заданном кулоновском поле (см. задачу 2).

13. Исходя из выражения (202), вычислить релятивистские поправки порядка v^2/c^2 к уровням $2s_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{1}{2}}$ и $2p_{\frac{3}{2}}$ атома водорода. Показать, что в этом приближении уровни $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ не меняются и сравнить это с точным результатом из § 27.

ГЛАВА XXI

КВАНТОВЫЕ ПОЛЯ. ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Se non è vero, è bene trovato *)

§ 1. Введение

Настоящая глава преследует две цели, с одной стороны, — являясь введением в квантовую теорию полей, познакомить читателя с понятием квантового поля, физическим смыслом, достижениями и трудностями теории; с другой стороны, — дать элементарное изложение квантовой теории электромагнитного излучения и его взаимодействия с атомными и ядерными системами.

При построении квантовой теории поля мы будем использовать тот же метод, что и для нерелятивистской квантовой теории частиц. В основе метода лежит принцип соответствия и канонический гамильтонов формализм классического поля. Единственным отличием является то, что в данном случае метод применяется к системе с бесконечным числом степеней свободы. Получившийся формализм называют гамильтоновым или каноническим квантованием.

Основной недостаток гамильтонова формализма заключается в отсутствии явной ковариантности [1]). Теорию можно строить и в явно ковариантной форме, используя ковариантные уравнения классического поля и метод квантования, сохраняющий ковариантность. Такая формулировка обладает неоспоримыми преимуществами как техническими, так и концептуальными. Многие вычисления упрощаются в силу того, что возникающие выражения должны сохранять компактную и симметричную форму. С другой стороны, ковариантный формализм использует сложный математический аппарат. Математические понятия гамильтонова формализма более привычны, и поэтому он лучше подходит для первого знакомства с предметом.

Глава состоит из четырех разделов. В первых двух разделах исследуется простейшее из полей — вещественное скалярное поле. Случай свободного поля рассматривается в разделе I,

*) Если и не верно, то хорошо сработано (*итал. посл., прим. перев.*).

[1]) Конечно, отсюда не следует, что нарушается принцип относительности. Однако релятивистская инвариантность теории не очевидна *a priori* и должна быть доказана. Такого доказательства мы приводить здесь не будем.

где излагается метод квантования классического поля, определяется пространство квантовых состояний и их физическая интерпретация. В разделе II мы изучаем взаимодействие поля с частицами, и на примере простой модели выясняем характерные свойства поля, взаимодействующего с атомными или ядерными системами. Приведенные в этом разделе приложения иллюстрируют методы, физическое содержание и трудности квантовой теории полей. В двух последних разделах рассматривается электромагнитное поле. В разделе III напоминается классическая теория, а квантовая теория и ее приложения кратко рассмотрены в разделе IV. Большинство утверждений и выкладок, относящихся к скалярному полю, без труда переносятся на случай электромагнитного поля. Мы кратко повторяем их, особо отмечая те отличия, которые вызваны векторным характером электромагнитного потенциала и нулевой массой фотона [1]).

Раздел I. КВАНТОВАНИЕ ВЕЩЕСТВЕННОГО СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ

§ 2. Классические свободные поля. Нормальные колебания

Классическое вещественное скалярное поле определяется в каждый момент времени t заданием его амплитуды $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$ в каждой точке пространства $\boldsymbol{r}$.

Поле можно рассматривать как динамическую систему с бесконечным числом степеней свободы. Каждой точке пространства отвечает некоторая координата системы — значение поля в этой точке.

Динамика такой системы не существенно отличается от динамики системы с конечным числом степеней свободы. Однако

[1]) Существует много монографий по квантовой электродинамике. Назовем в частности: *В. Гайтлер.* Квантовая теория излучения. М., ИЛ, 1956; *А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий.* Квантовая электродинамика М., «Наука», 1969; *Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков.* Введение в теорию квантованных полей, М., «Наука», 1976; *В. Тирринг.* Принципы квантовой электродинамики. М., «Высшая школа», 1964; *С. Швебер.* Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. М., ИЛ, 1963; *J. M. Jauch, F. Röhrlich.* The Theory of Photons and Electrons. Addison Wesley, 1956.

Гайтлер пользуется гамильтоновым формализмом и рассматривает основные приложения теории к атомной физике. Ахиезер и Берестецкий, Яух и Рорлих дают полное изложение ковариантного формализма и подробный обзор приложений. Боголюбов и Ширков, а также Швебер дают последовательное изложение квантовой теории поля в ковариантном формализме, включая подробное обсуждение проблемы перенормировки и вопросов причинности в теории поля. В книге Тирринга содержится общий обзор ковариантного формализма, обсуждение его физического смысла и трудностей теории. Обсуждение вопросов измерения величин и операторов, характеризующих поле, можно найти в классических работах: *N. Bohr, L. Rosenfeld,* Det. kld. Danske Viddenskab. Selskab. **12**, № 8 (1933); Phys. Rev. **78**, 794 (1950).

поскольку координаты в данном случае нумеруются *непрерывными* параметрами, например, тремя компонентами x, y, z радиус-вектора $\boldsymbol{r}$, дифференцирование по времени заменяется на частную производную и эволюция системы определяется уравнением движения вида

$$\ddot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t) \equiv \partial^2\Phi/\partial t^2 = F[\Phi(\boldsymbol{r}, t), \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)].$$

Правая часть этого уравнения F есть функционал амплитуды $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$ и ее частной производной $\dot{\Phi} \equiv \partial\Phi/\partial t$, которые берутся в один и тот же момент времени t. Динамическое состояние системы в данный момент времени определяется, если известны ее положение и скорость в начальный момент времени t_0, т. е. значения поля $\Phi(\boldsymbol{r}, t_0)$ и их производные по времени

$$\dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t_0) \equiv \frac{\partial\Phi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t}\Big|_{t=t_0}.$$

Из всех уравнений движения, которые инвариантны относительно неоднородной группы Лоренца, простейшим является уравнение Клейна — Гордона

$$[\Box + \mu^2]\Phi \equiv \ddot{\Phi} - \Delta\Phi + \mu^2\Phi = 0, \tag{1}$$

где μ — некоторая постоянная. Это линейное и однородное по Φ уравнение определяет эволюцию свободного поля. В дальнейшем мы увидим, что μ есть масса связанных с квантовым полем частиц (§ 6).

Если бы в левой части уравнения (1) отсутствовал член $\Delta\Phi$, то движения различных координат системы были бы независимыми и каждое представляло бы собой гармоническое колебание с частотой μ, а амплитуда и фаза определялись бы начальными условиями. Слагаемое $\Delta\Phi$ связывает эти гармонические колебания.

Сейчас мы покажем, что введя нормальные координаты, такое множество связанных осцилляторов можно преобразовать в множество независимых осцилляторов.

Обозначим $f_1, f_2, \ldots, f_i, \ldots$ полный ортонормированный набор вещественных собственных функций эрмитова оператора $(-\Delta)$. Спектр собственных значений расположен от 0 до $+\infty$. Собственное значение, отвечающее функции f_i, обозначим k_i^2. Таким образом, имеем

$$(\Delta + k_i^2) f_i = 0, \tag{2}$$

$$\int f_i(\boldsymbol{r}) f_j(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r} = \delta_{ij}, \tag{3}$$

$$\Sigma_i f_i(\boldsymbol{r}) f_i(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \tag{4}$$

Из соотношений ортогональности и замкнутости (3), (4) получаем разложения

$$\Phi(\boldsymbol{r}, t) = \Sigma_l q_l(t) f_l(\boldsymbol{r}), \tag{5}$$

$$q_l(t) = \int f_l(\boldsymbol{r}) \Phi(\boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{r}. \tag{6}$$

Величины $q_1, q_2, \ldots, q_i, \ldots$ представляют собой нормальные координаты. Из уравнений (6) и (1) получаем

$$\ddot{q}_l + \omega_l^2 q_l = 0, \tag{7}$$

$$\omega_l = (k_l^2 + \mu^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{8}$$

Таким образом, каждое q_l определяет движение независимого гармонического осциллятора с частотой ω_l. В силу уравнения (5) амплитуда поля равна линейной суперпозиции этих независимых осцилляторов.

В предыдущих рассуждениях мы предполагали, что базисные функции нумеруются дискретным индексом. В действительности спектр оператора $(-\Delta)$ непрерывный, заполняющий полуось $(0, +\infty)$, и функции нумеруются набором индексов, из которых по крайней мере один непрерывный. Несложно повторить приведенные выше рассуждения в случае непрерывных индексов. С учетом незначительных модификаций, на которых мы здесь не останавливаемся, результаты останутся теми же. Однако наличие непрерывных индексов осложняет изложение квантовой теории. Чтобы избежать этого, мы будем предполагать, что поле находится в конечном объеме пространства и на поверхности этого объема удовлетворяет подходящим граничным условиям. Физические величины, которые мы хотим сосчитать, получаются из величин, вычисляемых в формализме с конечным объемом, при неограниченном увеличении этого объема. Искусственный прием такого типа уже был описан в § V. 11. Этот прием, очевидно, не является строгим, следует отметить также, что он частично нарушает свойства инвариантности теории.

§ 3. Квантование свободного поля

Переход к нормальным координатам дает возможность проквантовать вещественное скалярное поле наиболее простым способом. Он заключается в сопоставлении каждой моде нормальных колебаний классического поля квантового осциллятора с той же частотой (см. главу XII).

Запишем классический гамильтониан в нормальных координатах. Пусть p_l — импульс, сопряженный q_l. Тогда уравне-

ние (7) эквивалентно гамильтоновым уравнениям

$$\dot{q}_i = p_i, \qquad \dot{p}_i = -\omega_i^2 q_i,$$

которые получаются, если для i-ой степени свободы взять гамильтониан

$$h_i = \frac{1}{2}(p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2). \tag{9}$$

Следовательно, полный гамильтониан имеет вид

$$H = \Sigma_i h_i. \tag{10}$$

Соответствующее квантовое поле получается заменой вещественных динамических переменных q_i и p_i на наблюдаемые, которые удовлетворяют коммутационным соотношениям ($\hbar = 1$),

$$[q_i, p_i] = i\delta_{ij}. \tag{11}$$

Каждой моде отвечает набор дискретных эквидистантных энергетических уровней

$$E_{n_i} = \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\omega_i \qquad (n_i = 0, 1, 2, \ldots \infty). \tag{12}$$

Для дальнейшего удобно ввести операторы рождения и уничтожения, которые мы обозначим через $b_i^\dagger$ и b_i соответственно,

$$b_i = (2\omega_i)^{-1/2}(\omega_i q_i + ip_i),$$
$$b_i^\dagger = (2\omega_i)^{-1/2}(\omega_i q_i - ip_i). \tag{13}$$

Коммутационные соотношения (11) для наблюдаемых эквивалентны коммутационным соотношениям для операторов рождения и уничтожения

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}, \tag{14}$$

а собственные векторы h_i получаются последовательным действием оператора $b_i^\dagger$ на вектор основного состояния (см. ур. (XII. 20)).

Взяв тензорное произведение собственных состояний гамильтонианов $h_1, h_2, \ldots, h_i, \ldots$, получим полный набор собственных состояний H. Такие состояния нумеруются квантовыми числами $n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots$, энергия состояния равна сумме энергий отдельных мод, входящих в это состояние;

$$E_{n_1 n_2 \ldots n_i \ldots} = \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\omega_i. \tag{15}$$

Нормированный собственный вектор, отвечающий такому состоянию, получается из вектора $|0\rangle$, представляющего основное

состояние, по формуле

$$|n_1 n_2 \ldots n_i \ldots\rangle = \prod_i \frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{(n_i!)^{1/2}} |0\rangle. \tag{16}$$

Поле в точке r представляется эрмитовым оператором $\Phi(r)$, который определяется равенством

$$\Phi(r) = \sum_i q_i f_i(r), \tag{17}$$

полученным по принципу соответствия из классической формулы (5). Удобно переписать формулу (17) в терминах операторов b_i и $b_i^\dagger$

$$\Phi(r) = \sum_i (2\omega_i)^{-\frac{1}{2}} (b_i + b_i^\dagger) f_i. \tag{18}$$

До сих пор поле рассматривалось как множество квантовых осцилляторов. В рассмотренных выше стационарных состояниях каждое квантовое число n определяло число квантов, относящихся к определенной моде нормальных колебаний. Собственным состояниям H и операторам системы можно также дать корпускулярную интерпретацию, которая уже обсуждалась в § XII. 6. Тогда n_i представляет собой число частиц в состоянии f_i с энергией ω_i, оно является собственным значением некоторого оператора N_i — оператора «числа частиц в состоянии f_i», который определяется равенством

$$N_i = b_i^\dagger b_i, \tag{19}$$

где b_i — оператор уничтожения частицы в состоянии f_i, а $b_i^\dagger$ — оператор рождения частицы в том же состоянии.

Интерпретация является самосогласованной, только если полная энергия данного динамического состояния равна сумме энергий частиц, образующих это состояние. Как уже отмечалось в § XII. 6, для этого достаточно из каждого гамильтониана h_i в правой части формулы (10) вычесть константу $\frac{1}{2}\omega_i$. Это изменение полного гамильтониана никак не влияет на уравнения движения, зато новый гамильтониан обладает желаемым свойством

$$H = \sum_i N_i \omega_i. \tag{20}$$

В частности, вакуум является состоянием с нулевой энергией, представляемым кет-вектором $|0\rangle$. Вектор $b_i^\dagger|0\rangle$ представляет состояние с одной частицей, и энергия этого состояния равна энергии этой частицы ω_i.

Рассматриваемые здесь частицы неразличимы и динамическое состояние всей системы полностью определяется числом частиц $n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots$ в каждом из индивидуальных состояний, $f_1, f_2, \ldots, f_i, \ldots$, в которых могут находиться частицы. Эти «числа заполнения» могут принимать целые неотрицательные значения от 0 до $+\infty$. Следовательно, рассматриваемые частицы подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна (см. § XIV. 6), и квантовое поле представляет собой *систему* с неопределенным числом *бозонов*.

В заключение этого параграфа сделаем замечание об основном состоянии системы. Вакуум квантового поля сильно отличается от классического вакуума. Последний является состоянием с минимальной энергией, в котором поле всюду равно нулю. В квантовом случае поле является оператором, который не коммутирует с гамильтонианом. Вакуумное ожидание поля равно нулю, что легко показать, используя свойства операторов b_i и $b_i^\dagger$, но среднеквадратичное отклонение отлично от нуля. Действительно, используя выражение (18) для поля, находим

$$\langle \Phi^2(\boldsymbol{r})\rangle_0 \equiv \sum_i \sum_j \frac{1}{2}(\omega_i\omega_j)^{-\frac{1}{2}} \langle 0 \,|\, (b_i + b_i^\dagger)(b_j + b_j^\dagger) \,|\, 0\rangle f_i(\boldsymbol{r}) f_j(\boldsymbol{r}),$$

и так как

$$\langle 0 \,|\, (b_i + b_i^\dagger)(b_j + b_j^\dagger) \,|\, 0\rangle = \langle 0 \,|\, b_i b_j^\dagger \,|\, 0\rangle = \delta_{ij},$$

получаем

$$\langle \Phi^2(\boldsymbol{r})\rangle_0 = \sum_i \frac{f_i^2(\boldsymbol{r})}{2\omega_i}.$$

В правой части стоит ряд из положительных членов, следовательно, мы получили отличное от нуля положительное значение. В действительности можно показать, что полученный ряд расходится [1]). Появление расходящихся величин характерно для систем с бесконечным числом степеней свободы и является источником серьезных трудностей в квантовой теории поля. Мы еще вернемся к этому вопросу в разделе II.

§ 4. Лагранжиан поля. Импульс, сопряженный к $\Phi(\boldsymbol{r})$

Прежде чем продолжать рассмотрение квантовой теории, вернемся к классической и опишем кратко обобщения лагранжева и гамильтонова формализмов для систем с бесконечным

[1]) С другой стороны, интеграл от поля по конечному объему имеет конечные флуктуации. Эти флуктуации возрастают с уменьшением области интегрирования и в пределе, когда объем стремится к нулю, стремятся к бесконечности (см. задачу 1).

числом степеней свободы. Если координаты нумеруются дискретным индексом, то обобщение очевидно. Такое обобщение было использовано в случае с нормальными координатами. Ситуация становится сложнее, если координаты зависят от непрерывного индекса, например, координаты поля определяются его амплитудой в каждой точке пространства. Именно такой выбор координат интересует нас здесь.

Функция Лагранжа L зависит от координат системы и скоростей; в данном случае L — функционал от Φ и $\dot{\Phi}$. Предположим, что она имеет вид

$$L = \int \mathscr{L}\, d\boldsymbol{r}. \tag{21}$$

Плотность лангражиана $\mathscr{L}$ зависит от $\boldsymbol{r}$ и t через Φ, градиент Φ и $\dot{\Phi}$

$$\mathscr{L} \equiv \mathscr{L}(\Phi, \partial\Phi/\partial x^k, \dot{\Phi}).$$

Зная L, можно определить действие

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L\, dt = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d\boldsymbol{r}\mathscr{L}, \tag{22}$$

которое также является некоторым функционалом от $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$. Уравнения движения получаются из принципа наименьшего действия (ур. (I. 12))

$$\delta I = 0 \text{ (предполагая, что } \delta\Phi(t_1) = \delta\Phi(t_2) = 0). \tag{23}$$

Из равенства (22) следует, что уравнения движения удовлетворяют принципу относительности, *если плотность лагранжиана $\mathscr{L}$ ведет себя при преобразованиях из группы Лоренца как скаляр*. Это условие на $\mathscr{L}$ упрощает нахождение функции Лагранжа.

В данном случае уравнения Лагранжа являются дифференциальными уравнениями в частных производных для $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$, которые получаются из принципа наименьшего действия

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\Phi}} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x^k}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial\Phi/\partial x^k)} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Phi} = 0. \tag{24}$$

Это есть уравнение движения для поля Φ.

Для более строгого определения координат поля делим мысленно все пространство на бесконечно малые области. Каждой такой области $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r} + d\boldsymbol{r})$ отвечает координата системы — величина $\Phi(\boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{r}$. Уравнения движения определяют зависимость координат от времени. В соответствии с обычным определением

импульс $\Pi(r, t)$, сопряженный координате $\Phi(r, t)\,dr$, равен функциональной производной L по скорости $\dot{\Phi}(r, t)$

$$\Pi(r, t) \equiv \frac{\delta L}{\delta \dot{\Phi}(r, t)\,dr} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\Phi}}. \tag{25}$$

Использованное здесь понятие функциональной производной является естественным обобщением понятия частной производной, и δL есть вариация L при условии, что Φ меняется на бесконечно малую величину $\delta\Phi$ в малой области dr в окрестности точки r и не меняется в остальной части пространства.

После того как мы определили для каждой координаты сопряженный импульс, можно сосчитать, в соответствии со стандартным определением (ур. (I. 13)), функцию Гамильтона, которая является функционалом от Φ и Π

$$H \equiv H[\Phi, \Pi] \equiv \int \Pi\dot{\Phi}\,dr - L = \int \mathscr{H}\,dr, \tag{26}$$

$$\mathscr{H} \equiv \mathscr{H}(\Phi, \partial\Phi/\partial x^k, \Pi) = \Pi\dot{\Phi} - \mathscr{L},$$

где $\mathscr{H}$ — плотность гамильтониана. Канонические гамильтоновы уравнения имеют вид (см. ур. (I. 14))

$$\dot{\Phi} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \Pi},$$

$$\dot{\Pi} = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \Phi} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x^k} \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial (\partial\Phi/\partial x^k)}. \tag{27}$$

В случае свободного скалярного поля в качестве плотности лагранжиана можно взять функцию

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left[(\partial_\mu \Phi)(\partial^\mu \Phi) - \mu^2\Phi^2\right] = \frac{1}{2}\left[\dot{\Phi}^2 - (\nabla\Phi)^2 - \mu^2\Phi^2\right], \tag{28}$$

поскольку уравнение (24) тогда совпадает с уравнением (1). Сопряженный к Φ импульс равен

$$\Pi = \dot{\Phi}, \tag{29}$$

а функция Гамильтона имеет вид

$$H = \frac{1}{2}\int (\Pi^2 + (\operatorname{grad}\Phi)^2 + \mu^2\Phi^2)\,dr. \tag{30}$$

Функция H совпадает с полученной ранее функцией (10), которая записана в терминах нормальных координат. Для того чтобы это показать, достаточно заменить Φ и Π их разложениями по q_i и p_i и воспользоваться свойствами функций f. Раз-

ложение для Φ мы знаем (ур. (5)). Для Π из уравнения (25) получаем

$$\Pi(\boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{r} = \frac{\delta L}{\delta \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)} = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\delta \dot{q}_i}{\delta \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)}.$$

По определению $p_i = \partial L/\partial \dot{q}_i$ в силу уравнения (6)

$$\dot{q}_i = \int f_i(\boldsymbol{r})\, \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)\, d\boldsymbol{r},$$

откуда

$$\frac{\delta \dot{q}_i}{\delta \dot{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)} = f_i(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r},$$

следовательно, мы имеем

$$\Pi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_i p_i f_i(\boldsymbol{r}). \tag{31}$$

Подставляя полученные разложения в H, имеем

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \left[p_i p_j \int f_i f_j\, d\boldsymbol{r} + q_i q_j \int (\nabla f_i \nabla f_j)\, d\boldsymbol{r} + \mu^2 q_i q_j \int f_i f_j\, d\boldsymbol{r} \right]. \tag{32}$$

Интегрируя по частям и применяя уравнение (2), получаем равенство

$$\int (\nabla f_i \nabla f_j)\, d\boldsymbol{r} = -\int f_i\, \Delta f_j\, d\boldsymbol{r} = k_i^2 \int f_i f_j\, d\boldsymbol{r}.$$

Подставляя полученное выражение в правую часть (32), используя соотношения ортонормированности функций $f(3)$ и определение ω_i (8), получаем упомянутое совпадение

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \left(p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2 \right).$$

(Напомним, что в квантовом случае данное выражение отличается от выражения (20) на бесконечную константу.)

При квантовании поля в качестве основных переменных можно брать как q_i и p_i или b_i и $b_i^\dagger$, так и $\Phi(\boldsymbol{r})$ и $\Pi(\boldsymbol{r})$. Коммутационные соотношения для Φ и Π можно получить из коммутационных соотношений для b и $b^\dagger$. Из уравнений (13) и разложения (31) находим

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = \sum_i \frac{1}{2} i \sqrt{2\omega_i} \left(b_i^\dagger - b_i \right) f_i(\boldsymbol{r}). \tag{33}$$

Используя разложения (18) и (33), коммутационные соотношения для b и $b^\dagger$ и соотношение замкнутости (4), получаем

$$[\Phi(r), \Phi(r')] = [\Pi(r), \Pi(r')] = 0,$$
$$[\Phi(r), \Pi(r')] = i\delta(r - r'). \tag{34}$$

§ 5. Комплексные базисные функции

В предыдущем параграфе мы видели, как можно проквантовать поле, не прибегая к нормальным координатам. Однако использование нормальных координат обычно упрощает вычисления, а также интерпретацию квантового поля. В силу вырожденности собственных значений оператора $(-\Delta)$ имеется большой произвол в выборе базисных функций и нормальных координат. В частности, можно проквантовать поле с помощью комплексных базисных функций. В этом параграфе мы рассмотрим такой метод квантования и покажем, что полученное квантовое поле не зависит от выбора базисных функций.

Пусть $u_1, u_2, \ldots, u_s, \ldots$ — полный ортонормированный базис, а ω_s — соответствующие энергии, так что (см. ур. (2)—(4), (8))

$$\int u_s^* u_t \, dr = \delta_{st}, \quad \sum_s u_s(r) u_s^*(r') = \delta(r - r'), \tag{35}$$

$$(\Delta + k_s^2) u_s = 0, \tag{36}$$

$$\omega_s = (k_s^2 + \mu^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{37}$$

С каждой модой u_s связаны два эрмитово-сопряженных оператора, a_s и $a_s^\dagger$, которые удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[a_s, a_t] = [a_s^\dagger, a_t^\dagger] = 0, \quad [a_s, a_t^\dagger] = \delta_{st}. \tag{38}$$

Используя эти операторы, можно построить пространство динамических состояний системы. Таким образом, каждой моде u_s отвечает квантовый гармонический осциллятор, а операторы a_s и $a_s^\dagger$ интерпретируются как операторы уничтожения и рождения частицы в состоянии u_s. Наблюдаемые системы выражаются через операторы рождения и уничтожения. Например, наблюдаемая $N_s \equiv a_s^\dagger a_s$ соответствует числу частиц, находящихся в состоянии u_s. Для поля $\Phi(r)$ справедливо разложение (см. ур. (18))

$$\Phi(r) = \sum_s (2\omega_s)^{-\frac{1}{2}} (a_s u_s(r) + a_s^\dagger u_s^*(r)), \tag{39}$$

для сопряженного импульса $\Pi(r)$ — разложение (см. ур. (33))

$$\Pi(r) = \sum_s \frac{1}{2} i (2\omega_s)^{\frac{1}{2}} (a_s^\dagger u_s^*(r) - a_s u_s(r)), \tag{40}$$

для гамильтониана H, определяющего эволюцию системы (ур. (20)),

$$H = \sum_s a_s^\dagger a_s \omega_s. \tag{41}$$

Найдем теперь связь между a, $a^\dagger$ и операторами b, $b^\dagger$ из § 3 и покажем, что построенная здесь система совпадает с квантовой системой, определенной в § 3.

Мы обозначали индексом s множество квантовых чисел, нумерующих функции u. По условию в этом множестве имеется квантовое число, определяющее энергию, и дополнительные квантовые числа σ, которые параметризуют функции, отвечающие одному значению энергии. Будем параметризовать энергию волновым числом k

$$\omega = (k^2 + \mu^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{42}$$

Таким образом $s \equiv (k, \sigma)$.

Аналогичным образом индекс i, нумерующий функции f, представляет собой множество квантовых чисел, которое состоит из волнового числа k, определяющего энергию, и дополнительного множества квантовых чисел ρ: $i \equiv (k, \rho)$.

Функции $f_{k\rho}$, отвечающие данному значению k, связаны с функциями $u_{k\sigma}$ посредством унитарного преобразования (T — унитарная матрица)

$$u_{k\sigma} = \sum_\rho T_{\sigma\rho} f_{k\rho}, \qquad f_{k\rho} = \sum_\sigma (T^\dagger)_{\rho\sigma} u_{k\sigma}. \tag{43}$$

Все величины, которые появляются ниже, отвечают фиксированному значению k, поэтому в дальнейшем индекс k мы будем опускать.

Для того чтобы разложения (18) и (39) задавали один и тот же оператор $\Phi(r)$, а разложения (33) и (40) — оператор $\Pi(r)$, необходимо и достаточно, чтобы для любого значения k выполнялось равенство

$$\sum_\sigma a_\sigma u_\sigma = \sum_\rho b_\rho f_\rho.$$

Принимая во внимание второе из соотношений (43), видим, что это эквивалентно равенствам

$$a_\sigma = \sum_\rho T_{\sigma\rho}^* b_\rho \tag{44}$$

или

$$a_\sigma^\dagger = \sum_\rho T_{\sigma\rho} b_\rho^\dagger. \tag{44†}$$

Таким образом, мы установили линейное соответствие между операторами a, $a^\dagger$ и b, $b^\dagger$. Более точно, линейное соотношение между операторами рождения $b^\dagger$ и $a^\dagger$ ($44^\dagger$) тождественно линейному соотношению между функциями f и u (43).

Из равенств (44) и ($44^\dagger$) следует, что разложения (18) и (39) определяют одно и то же поле $\Phi(\boldsymbol{r})$. Для эквивалентности двух методов квантования данного поля необходимо, чтобы так определенные операторы a и $a^\dagger$ удовлетворяли коммутационным соотношениям (38), а определяемый уравнением (20) гамильтониан H, будучи записан в терминах операторов a, $a^\dagger$, имел вид (41). Это легко доказать, используя унитарность матрицы T. Действительно, для каждого значения k имеем

$$[a_\sigma,\ a^\dagger_{\sigma'}] = \sum_{\rho\rho'} T^*_{\sigma\rho} T_{\sigma'\rho'} [b_\rho,\ b^\dagger_{\rho'}] = \sum_{\rho\rho'} T^*_{\sigma\rho} T_{\sigma'\rho'} \delta_{\rho\rho'} = \delta_{\sigma\sigma'},$$

откуда следует

$$[a_s,\ a^\dagger_{s'}] = \delta_{ss'}.$$

Точно так же для каждого значения k получаем

$$\sum_\sigma a^\dagger_\sigma a_\sigma = \sum_{\rho\rho'} \sum_\sigma T_{\sigma\rho} T^*_{\sigma\rho'} b^\dagger_\rho b_{\rho'} = \sum_{\rho\rho'} \delta_{\rho\rho'} b^\dagger_\rho b_{\rho'} = \sum_\rho b^\dagger_\rho b_\rho,$$

откуда следует требуемое выражение для H.

§ 6. Плоские волны. Определение импульса

Среди различных наборов комплексных базисных функций имеется выделенный набор — плоские волны. Как мы увидим ниже, они соответствуют состояниям отдельных частиц с определенным импульсом.

Для того чтобы иметь дело с дискретными индексами, мы будем предполагать, что поле заключено в кубе со стороной L, и потребуем для функций u_s выполнения соотношения

$$u_s\left(\tfrac{1}{2}L,\ y,\ z\right) = u_s\left(-\tfrac{1}{2}L,\ y,\ z\right)$$

и аналогичных соотношений для аргументов y и z. Данные условия являются простыми обобщениями условия периодичности, описанного в § V. 11.

В качестве базисных функций мы можем выбрать плоские волны

$$u_k = L^{-\frac{3}{2}} e^{ikr}, \tag{45}$$

для которых компоненты волнового вектора кратны $2\pi/L$

$$k_x = 2\pi n_x/L, \quad k_y = 2\pi n_y/L, \quad k_z = 2\pi n_z/L.$$

Мы получаем полную ортонормированную систему базисных функций, придавая числам n_x, n_y, n_z все возможные целые значения

$$n_x,\ n_y,\ n_z = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots$$

Каждой из этих плоских волн соответствует оператор уничтожения a_k и оператор рождения $a_k^\dagger$. Поле $\Phi(r)$ задается разложением (см. ур. (39))

$$\Phi(r) = \sum_k (2\omega_k L^3)^{-\frac{1}{2}} (a_k e^{ikr} + a_k^\dagger e^{-ikr}), \tag{46}$$

сопряженный полю импульс (см. ур. (40))

$$\Pi(r) = \sum_k i (\omega_k/2L^3)^{\frac{1}{2}} (a_k^\dagger e^{-ikr} - a_k e^{ikr}), \tag{47}$$

а гамильтониан (см. ур. (41))

$$H = \sum_k (a_k^\dagger a_k)\, \omega_k, \tag{48}$$

где суммирование происходит по всем возможным значениям k, т. е. по всем возможным значениям n_x, n_y, n_z.

Как уже объяснялось в § V. 11, ответы для случая неограниченного пространства получаются при стремлении L к бесконечности. В этом пределе суммирование заменяется интегрированием. В каждом малом интервале $(k,\ k + \delta k)$ имеется $(L/2\pi)^3 \delta k$ возможных значений трех чисел n_x, n_y, n_z. Если допустить, что суммируемые члены можно рассматривать как непрерывные функции параметра k (это естественно, имея в виду предельный переход $L \to \infty$), то каждый символ $\sum$ можно заменить на символ интегрирования

$$\sum \to \int (L/2\pi)^3\, dk.$$

Величина $(L/2\pi)^3$ есть плотность индивидуальных состояний в пространстве волновых векторов. Название *плотность уровней* используют, как правило, для числа состояний в единице телесного угла и в единичном интервале энергии, так что плотность уровней есть функция энергии $\rho_L(\omega)$. Число состояний $\rho_L d\Omega\, d\omega$, волновой вектор которых находится в телесном угле $(\Omega,\ \Omega + d\Omega)$, а энергия расположена в интервале $(\omega,\ \omega + d\omega)$, равно

$$\rho_L\, d\Omega\, d\omega = (L/2\pi)^3\, k^2\, (dk/d\omega)\, d\omega\, d\Omega = (L/2\pi)^3\, \omega k\, d\omega\, d\Omega.$$

Следовательно,

$$\rho_L(\omega) = L^3 \omega k/(2\pi)^3 \tag{49}$$

(см. ур. (XVII. 52)).

В действительности, можно полностью устранить искусственное введение куба и использовать плоские волны, заданные во всем пространстве. Тогда волновой вектор $\boldsymbol{k}$ может принимать без ограничений все возможные значения, и плоские волны зависят от 3 непрерывных индексов k_x, k_y, k_z, а нормировка с символами Кронекера заменится на нормировку с δ-функциями.

В качестве базисных выбирают функции

$$u(\boldsymbol{k}) \equiv u(\boldsymbol{k};\ \boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}/(2\pi)^{3/2}$$

и с каждой из них связывают эрмитово-сопряженные операторы $a(\boldsymbol{k})$ и $a^\dagger(\boldsymbol{k})$. Все формулы получаются из предыдущих заменой u_k на $(2\pi/L)^{3/2} u(\boldsymbol{k})$, a_k на $(2\pi/L)^{3/2} a(\boldsymbol{k})$, символа $\sum$ на $\int (L/2\pi)^3\, d\boldsymbol{k}$. Так, основные свойства базисных функций (см. ур. (35), (36) (37)) примут вид

$$\int u^*(\boldsymbol{k};\ \boldsymbol{r})\, u(\boldsymbol{k}';\ \boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'), \qquad \int u(\boldsymbol{k};\ \boldsymbol{r})\, u^*(\boldsymbol{k};\ \boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{k} = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

$$(\Delta + k^2)\, u(\boldsymbol{k};\ \boldsymbol{r}) = 0,$$

$$\omega(\boldsymbol{k}) = (k^2 + \mu^2)^{1/2}.$$

Коммутационные соотношения операторов $a(\boldsymbol{k})$ и $a^\dagger(\boldsymbol{k})$ равны (см. ур. (38))

$$[a(\boldsymbol{k}),\ a(\boldsymbol{k}')] = [a^\dagger(\boldsymbol{k}),\ a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = 0,$$

$$[a(\boldsymbol{k}),\ a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}').$$

Поля $\Phi(\boldsymbol{r})$ и $\Pi(\boldsymbol{r})$ запишутся в виде интегралов (см. ур. (39) и (40))

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d\boldsymbol{k}}{\sqrt{2\omega}} \left(a(\boldsymbol{k})\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} + a^\dagger(\boldsymbol{k})\, e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\right),$$

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^{-3/2} i \int \sqrt{\frac{\omega}{2}}\, d\boldsymbol{k} \left(a^\dagger(\boldsymbol{k})\, e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} - a(\boldsymbol{k})\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\right),$$

а гамильтониан (см. ур. (41))

$$H = \int a^\dagger(\boldsymbol{k})\, a(\boldsymbol{k})\, \omega(\boldsymbol{k})\, d\boldsymbol{k}.$$

Остается установить связь между импульсом поля $\boldsymbol{W}$ и разложением на плоские волны.

По определению векторный оператор $\boldsymbol{W}$ связан с бесконечно малыми преобразованиями по формуле (XV. 41). При конечном преобразовании $\mathcal{T}(\boldsymbol{a})$ (обозначения § XV. 9) оператор $\Phi(\boldsymbol{r}_0)$, дающий амплитуду поля в точке $\boldsymbol{r}_0$, переходит в оператор $\Phi(\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{a})$, дающий амплитуду поля в точке, которая получается из $\boldsymbol{r}_0$ сдвигом [1]). Точно так же $\Pi(\boldsymbol{r}_0)$ преобразуется в $\Pi(\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{a})$.

[1]) Подчеркнем отличие от закона преобразования наблюдаемой x из § XV. 9 (см. предыдущую сноску). Здесь $\boldsymbol{r}_0$ — параметр, фиксирующий точку в пространстве, где измеряется амплитуда поля.

Используя этот закон преобразования наблюдаемых в случае, когда a равно бесконечно малому вектору ε, получаем

$$[(\varepsilon W),\ \Phi(r_0)] = i(\varepsilon\nabla)\Phi|_{r=r_0},$$
$$[(\varepsilon W),\ \Pi(r_0)] = i(\varepsilon\nabla)\Pi|_{r=r_0}. \tag{50}$$

Поскольку эти коммутационные соотношения должны быть выполнены для любого r_0, они определяют W с точностью до постоянного (векторного) слагаемого. Так, компонента W_x по оси x является оператором, который с точностью до константы определяется коммутационными соотношениями

$$[W_x,\ \Phi(r_0)] = i\frac{\partial\Phi}{\partial x}\Big|_{r=r_0}, \tag{51}$$

$$[W_x,\ \Pi(r_0)] = i\frac{\partial\Pi}{\partial x}\Big|_{r=r_0}. \tag{52}$$

Предыдущие соотношения выполнены, если

$$W_x = -\int \Pi\frac{\partial\Phi}{\partial x}\,dr + \text{const}. \tag{53}$$

Интегрируя по частям, получаем эквивалентное выражение

$$W_x = \int \frac{\partial\Pi}{\partial x}\Phi\,dr + \text{const}. \tag{54}$$

Подставляя выражение (53) в левую часть уравнения (51) и используя коммутационные соотношения (34), находим

$$\left[-\int \Pi(r)\frac{\partial\Phi(r)}{\partial x}\,dr,\ \Phi(r_0)\right] = -\int [\Pi(r),\ \Phi(r_0)]\frac{\partial\Phi(r)}{\partial x}\,dr =$$
$$= i\int \delta(r-r_0)\frac{\partial\Phi(r)}{\partial x}\,dr = i\frac{\partial\Phi}{\partial x}\Big|_{r=r_0}.$$

Аналогичным образом можно показать, что соотношение (52) выполнено, если воспользоваться для W_x выражением (54).

Такие же формулы справедливы для W_y и W_z. Следовательно, мы получили три компоненты W с точностью до постоянных слагаемых, которые определяются из требования, чтобы W был векторным оператором. Таким образом, импульс поля можно записать в виде двух эквивалентных выражений

$$W = -\int \Pi(\nabla\Phi)\,dr = \tag{55}$$

$$= +\int (\nabla\Pi)\Phi\,dr. \tag{56}$$

[*N. B.* В классической теории для импульса получаются выражения, которые формально тождественны приведенным.]

Выразим теперь W в терминах операторов a_k и $a_k^\dagger$. Для этого подставим в правую часть равенства (55) вместо Ф и П их разложения (46) и (47) соответственно и воспользуемся соотношениями ортогональности для плоских волн. Получим

$$W = \frac{1}{2}\sum_k k\left(a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger - a_k a_{-k} - a_{-k}^\dagger a_k^\dagger\right)$$

или, используя коммутационные соотношения для операторов a и $a^\dagger$,

$$W = \sum_k \left(a_k^\dagger a_k\right) k + \frac{1}{2}\sum_k k\left(1 - a_{-k}a_k - a_{-k}^\dagger a_k^\dagger\right).$$

Суммирование в полученных формулах происходит по всем возможным значениям k. Выражение в скобках под знаком последней суммы не меняется при замене k на $-k$. Следовательно, два слагаемых, отвечающие k и $-k$, отличаются только знаком и эта сумма равна нулю. Таким образом,

$$W = \sum_k \left(a_k^\dagger a_k\right) k. \tag{57}$$

Отсюда легко получить коммутационные соотношения W с операторами a и $a^\dagger$

$$[W, a_k] = -ka_k, \tag{58}$$

$$[W, a_k^\dagger] = +ka_k^\dagger. \tag{59}$$

Формулы (57), (58) и (59) просто интерпретировать, если считать, что частица в состоянии u_k имеет импульс k. Поскольку $\left(a_k^\dagger a_k\right)$ определяет число частиц в состоянии u_k, формула (57) означает просто, что полный импульс поля W равен сумме импульсов частиц, образующих поле. Точно так же, формулы (58) и (59) согласуются с интерпретацией операторов a_k и $a_k^\dagger$ как операторов уничтожения и рождения частицы с импульсом k. Действительно, если $|w\rangle$ — собственный вектор оператора полного импульса, отвечающий собственному значению w, то вектор $a_k|w\rangle$ (в случае, если этот вектор отличен от нуля, т. е. состояние поля содержит хоть одну частицу с импульсом k) удовлетворяет уравнению

$$Wa_k|w\rangle = a_k(W - k)|w\rangle = a_k(w - k)|w\rangle = (w - k)a_k|w\rangle.$$

Точно так же, используя формулу (59), получаем

$$Wa_k^\dagger|w\rangle = (w + k)a_k^\dagger|w\rangle.$$

Отметим, что связанные с полем частицы с импульсом $\boldsymbol{k}$ имеют энергию $\omega = (k^2 + \mu^2)^{1/2}$. *Следовательно, масса этих частиц равна* μ.

§ 7. Сферические волны. Определение момента импульса

В качестве базисных функций часто используются плоские волны. Столь же часто, вероятно, используются и сферические волны. В последнем случае базисные функции равны

$$u_{klm} \equiv \text{const}\, j_l(kr)\, Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{60}$$

и зависят от непрерывного индекса k и двух дискретных индексов l и m. Для того чтобы иметь дело только с дискретными индексами, можно предположить, что поле содержится внутри сферы радиуса R, и потребовать обращения базисных функций в нуль на поверхности сферы. Формулы для случая неограниченного пространства получаются предельным переходом $R \to \infty$.

Используя новые базисные функции, можно повторить все рассуждения предыдущего параграфа. Таким образом, вводятся операторы уничтожения a_{klm} и рождения $a_{klm}^\dagger$ частицы в состоянии, описываемом сферической волной u_{klm}.

Можно показать, что сферические волны отвечают одночастичным состояниям с определенным моментом импульса, точно так же как плоские волны отвечают одночастичным состояниям с определенным импульсом. Для полного момента импульса поля $\boldsymbol{I}$ получаем выражение

$$\boldsymbol{I} = -\int \Pi\, (\boldsymbol{l}\Phi)\, dr, \tag{61}$$

где $\boldsymbol{l}$ есть оператор $-i(\boldsymbol{r} \times \nabla)$, действующий на функцию Φ

$$\boldsymbol{l}\Phi = -i\boldsymbol{r} \times (\nabla\Phi).$$

Можно использовать также эквивалентное выражение

$$\boldsymbol{I} = \int (\boldsymbol{l}\Pi)\, \Phi\, dr.$$

Операторы a_{klm} и $a_{klm}^\dagger$ интерпретируются соответственно как операторы уничтожения и рождения частицы с энергией $\omega = (k^2+\mu^2)^{1/2}$ и моментом импульса (lm). Кроме этого, $(2l+1)$ операторов $a_{klm}^\dagger$, отвечающие данному значению l и k, образуют стандартные компоненты неприводимого тензорного оператора порядка l, а $(2l+1)$ операторов a_{klm} образуют с точностью до порядка и знака стандартные компоненты эрмитово-сопряженного тензорного оператора (определение § XIII. 30).

§ 8. Пространственное отражение и обращение времени

К преобразованиям, оставляющим инвариантными уравнения движения, относятся отражение пространства и обращение времени. Эти преобразования полностью определяются их действием на поле $\Phi(r)$ и сопряженный ему импульс $\Pi(r)$, соответствующие (унитарный или антиунитарный) операторы преобразований определяются с точностью до фазового множителя.

При *отражении пространства* имеем

$$\Phi(r) \to \Phi(-r), \quad \Pi(r) \to \Pi(-r). \tag{I}$$

Это закон преобразования скалярного поля, соответствующий оператор преобразования S_0 — *унитарный* и, следовательно, коммутационные соотношения полей при этом преобразовании не меняются. Поскольку все операторы теории являются функциями Φ и Π, то из соотношений (I) легко получить закон их преобразования при пространственном отражении. В частности, для операторов a и a^+, связанных с разложением по плоским волнам, получаем

$$\begin{aligned} S_0 a_k S_0^+ &= a_{-k}, \\ S_0 a_k^+ S_0^+ &= a_{-k}^+. \end{aligned} \tag{II}$$

В случае *обращения времени* поле Φ не меняется, а скорость меняет свое направление на противоположное, следовательно,

$$\Phi(r) \to \Phi(r), \quad \Pi(r) \to -\Pi(r). \tag{I'}$$

Соответствующий этому преобразованию оператор K — *антиунитарный* и коммутационные соотношения полей при преобразовании меняют знак. Закон преобразования операторов a и a^+ легко следует из определения этих операторов и закона (I')

$$\begin{aligned} K a_k K^+ &= a_{-k}, \\ K a_k^+ K^+ &= a_{-k}^+. \end{aligned} \tag{II'}$$

Таким образом, операторы рождения и уничтожения преобразуются одинаково при пространственном отражении и обращении времени. Не следует, однако, путать эти преобразования, поскольку одно является унитарным, а другое — антиунитарным.

Преобразования (I) или (II) и (I') или (II') определяют операторы S_0 и K с точностью до фазового множителя. Мы устраним произвол в фазе, потребовав чтобы вектор $|0\rangle$ был инвариантен относительно этих преобразований

$$S_0 |0\rangle = |0\rangle, \quad K |0\rangle = |0\rangle.$$

Раздел II. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С АТОМНОЙ СИСТЕМОЙ

§ 9. Взаимодействие с системой частиц

Рассмотрим взаимодействие поля и частицы. Нижеследующие рассуждения в существенном не изменятся, если частицу заменить системой нескольких частиц.

Динамические переменные системы частица + поле являются функциями основных переменных подсистем. В качестве основных переменных частицы, которую мы будем считать для простоты бесспиновой, возьмем вектор $\boldsymbol{R}$, описывающий ее поло-

жение, и ее импульс $\boldsymbol{P}$. В качестве основных переменных поля мы можем взять $\Phi(\boldsymbol{r})$ и $\Pi(\boldsymbol{r})$ или определенные в предыдущем параграфе операторы рождения и уничтожения. В дальнейшем мы будем часто использовать операторы a_k и $a_k^\dagger$, связанные с разложением по плоским волнам.

Состояния всей системы образуют пространство, которое является произведением пространства состояний частицы $\mathscr{E}_{\text{част}}$ и пространства состояний свободного поля $\mathscr{E}_{\text{п}}$.

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_{\text{п}} \otimes \mathscr{E}_{\text{част}}.$$

Гамильтониан всей системы равен сумме трех слагаемых

$$H = H_{\text{част}} + H_{\text{п}} + H'. \tag{62}$$

Первые два слагаемых отвечают свободным подсистемам, последнее представляет собой энергию взаимодействия.

Выше мы получили несколько эквивалентных выражений для гамильтониана свободного поля $H_{\text{п}}$, отметим, в частности, выражение (48). Гамильтониан $H_{\text{част}}$ описывает эволюцию частицы без поля Ф. Предположим для определенности, что частица находится во внешнем потенциальном поле и ее масса M удовлетворяет неравенству $M \gg \mu$. Будем считать, что движение частицы можно рассматривать в нерелятивистском приближении, т. е.

$$H_{\text{част}} = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + V(R). \tag{63}$$

Остается определить H'. Простейшее из возможных выражений для H' получится, если предположить, что взаимодействие пропорционально величине амплитуды поля в точке R, где находится частица

$$H' = g\Phi(\boldsymbol{R}) = \tag{64}$$

$$= gL^{-\frac{3}{2}} \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} (a_k e^{ikR} + a_k^\dagger e^{-ikR}). \tag{64'}$$

Безразмерная постоянная g называется *константой связи*. Вторая формула для H' получается из первой и разложения (46).

Такая форма взаимодействия почти однозначно определяется из требования релятивистской инвариантности. Однако в исследуемой здесь теории с самого начала используется нерелятивистское приближение. Это следует не только из того факта, что $H_{\text{част}}$ не обладает ковариантными свойствами, вытекающими из принципа относительности, но и потому, что сама концепция материальной системы, состоящей из одной или определенного числа частиц, не может быть оправдана в релятивистской квантовой механике. Эти два ограничения, имеющиеся

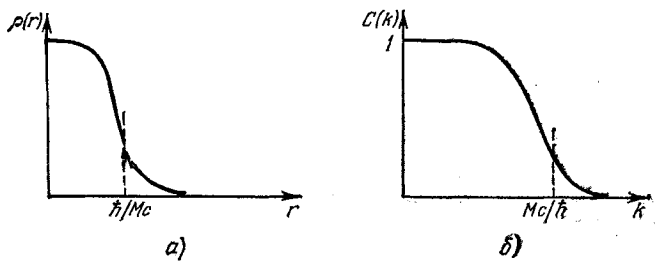
в теории, следует иметь в виду при выборе H'. Выбору может помочь исследование из главы XX о нерелятивистском приближении для уравнения Дирака. Оно подсказывает нам, что взаимодействие поля и нерелятивистской частицы массы M не является локальным, как записано в формуле (64), а зависит от значений поля в области размером $1/M$ с центром в точке, где находится частица. Поэтому выражение (64) для H' мы заменим на выражение

$$H' = g \int \Phi(\boldsymbol{r})\, \rho(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}|)\, d\boldsymbol{r}, \tag{65}$$

где $\rho(\boldsymbol{r}) \equiv \rho(r)$ — вещественная, сферически-симметричная функция, удовлетворяющая условию нормировки

$$\int \rho(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r} = 4\pi \int_0^\infty \rho(r)\, r^2\, dr = 1$$

и сосредоточенная в области радиуса $1/M$ с центром в начале координат (см. рис. 23, *а*). Подставляя в правую часть формулы (65) вместо этой функции $\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R})$, мы получим формулу (64).



а) *б)*

Рис. 23. Общий вид функций $\rho(r)$ и $C(k)$.

Мы назовем *обрезающей* функцию $C(k)$, которая определяется равенством

$$C(k) = \int e^{ikr} \rho(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}.$$

Это вещественная, сферически-симметричная функция, удовлетворяющая условию $C(0) = 1$ и в силу хорошо известного свойства преобразования Фурье сосредоточенная в окрестности точки $k = 0$ размером порядка M (см. рис. 23, *б*). Подставляя в правую часть формулы (65) разложение (46) для $\Phi(\boldsymbol{r})$, после несложных вычислений получаем

$$H' = gL^{-3/2} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{C(k)}{\sqrt{2\omega_k}} \left(a_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} + a_{\boldsymbol{k}}^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}}\right). \tag{66}$$

Отличие от формулы (64′) заключается только в присутствии множителя $C(k)$ в каждом слагаемом. Этот множитель обрезает вклад во взаимодействие высокочастотных членов, для которых $k \gtrsim M$.

Покажем, что пренебрежение вкладом высоких частот согласуется с нерелятивистским приближением. Каждое слагаемое в сумме (66) соответствует передаче определенного импульса и энергии от частицы полю и обратно. Так, член $a_k e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}}$ соответствует поглощению кванта поля с импульсом $\boldsymbol{k}$ и энергией ω_k и передаче этого импульса и энергии частице, член $a_k^+ e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}}$ соответствует рождению кванта поля с импульсом $\boldsymbol{k}$ и энергией ω_k и уменьшению на эти величины импульса и энергии частицы. Если $k \gtrsim M$, то изменение энергии достаточно велико, так что может нарушиться закон сохранения частиц и поле может поглотить частицу или испустить вторую частицу массы M. Таким образом, нерелятивистское приближение оправдано только, если вклад высокочастотных слагаемых пренебрежимо мал, и результаты, которые дает это приближение, если они справедливы, не должны меняться при введении функции $C(k)$. *A fortiori*, они должны быть нечувствительны к форме этой функции. В дальнейшем мы считаем, что

$$C(k) = \begin{cases} 1 & \text{для } 0 \leqslant k \leqslant K, \\ 0 & \text{для } k > K, \end{cases} \tag{67}$$

а параметр K имеет значение порядка M.

Исследуем свойства инвариантности H. Из уравнения (65) видно, что H' инвариантен относительно сдвигов и вращений всей системы (поле + частица), поскольку легко показать, что H' коммутирует с операторами полного импульса $\boldsymbol{P} + \boldsymbol{W}$ и полного момента импульса $(\boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}) + \boldsymbol{I}$ системы. Оператор H' инвариантен также относительно пространственного отражения, при котором $\Phi(\boldsymbol{r})$ переходит в $\Phi(-\boldsymbol{r})$ (скалярное поле). Этими же свойствами инвариантности обладают гамильтонианы $H_\text{п}$ и (при условии, что $V(R) = 0$) $H_\text{част}$, а следовательно, и полный гамильтониан системы H. Если $V(R) \neq 0$, то $H_\text{част}$ инвариантен только по отношению к вращениям и отражению и, следовательно, H инвариантен относительно вращений и отражений, но не инвариантен относительно трансляций.

Рассматриваемая квантовая система интересна в силу того, что она в простейшей форме демонстрирует основные свойства атома, взаимодействующего с электромагнитным излучением. Частица является аналогом атома, а скалярное поле — аналогом электромагнитного излучения. Основное отличие заключается в том, что кванты электромагнитного поля — фотоны —

имеют нулевую массу и спин 1, в то время как кванты исследуемого скалярного поля имеют нулевой спин и отличную от нуля массу. В оставшейся части этого раздела мы воспользуемся этой упрощенной моделью для изучения характерных свойств атома, находящегося в электромагнитном поле.

§ 10. Слабая связь и рассмотрение по теории возмущений

При достаточно малых g оператор H' можно считать малым возмущением и использовать методы, развитые в главах XVI и XVII.

Невозмущенный гамильтониан имеет вид

$$H_0 \equiv H_{\text{п}} + H_{\text{част}}.$$

В теории возмущений используют представление, в котором диагонален оператор H_0. Мы будем пользоваться представлением, базисные векторы которого получаются следующим образом. Обозначим $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, ..., $|\lambda\rangle$, ... полный ортонормированный набор собственных векторов $H_{\text{част}}$, рассматриваемого как оператор в пространстве $\mathscr{E}_{\text{част}}$, и E_α, E_β, ..., E_λ, ... — соответствующие собственные значения (расположенные в порядке возрастания). Умножая данный вектор $|\lambda\rangle$ этого множества на вакуумный вектор $|0\rangle$ пространства $\mathscr{E}_{\text{п}}$, получаем вектор пространства $\mathscr{E}$, который для упрощения записи будем также обозначать $|\lambda\rangle$. Ясно, что

$$H_0 |\lambda\rangle = E_\lambda |\lambda\rangle.$$

Полный ортонормированный набор собственных векторов оператора $H_{\text{п}}$ в пространстве $\mathscr{E}_{\text{п}}$ можно получить, последовательно действуя операторами рождения $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ на вакуумный вектор $|0\rangle$ (см. ур. (16)). Точно так же полный ортонормированный набор собственных векторов H_0 в пространстве $\mathscr{E}$ можно получить последовательным применением операторов рождения $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ к каждому из определенных выше векторов $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, ..., $|\lambda\rangle$, ... Так будет получен требуемый базис. Пусть $|n\rangle$ — один из векторов этого базиса и E_n — соответствующая энергия

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle.$$

В динамическом состоянии $|n\rangle$ частица находится в определенном собственном состоянии оператора $H_{\text{част}}$, а поле содержит определенное число квантов с заданными импульсами.

В дальнейшем мы будем пользоваться только векторами с небольшим числом квантов и параметризовать эти векторы будем греческой буквой, соответствующей динамическому состоянию частицы, и волновыми векторами каждого из квантов поля. Так, $|\lambda \boldsymbol{k}\rangle$ представляет состояние, которое получается

добавлением кванта с импульсом $\boldsymbol{k}$ к частице в состоянии λ, $|\lambda \boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle$ — состояние, получающееся добавлением двух квантов с импульсами $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$ к частице в состоянии λ и т. д. Отметим, что

$$H_0|\lambda \boldsymbol{k}\rangle = (E_\lambda + \omega_k)|\lambda \boldsymbol{k}\rangle,$$
$$H_0|\lambda \boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle = (E_\lambda + \omega_k + \omega_{k'})|\lambda \boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle. \qquad (68)$$

Имеем также $|\lambda \boldsymbol{k}\rangle = a_k^\dagger|\lambda\rangle$ и, если $\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}'$, $|\lambda \boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle = a_k^\dagger a_{k'}^\dagger|\lambda\rangle$.

Характерная спектроскопическая диаграмма нижних уровней энергии гамильтониана H_0 изображена на рис. 24. В соответствии с обычными соглашениями о таких диаграммах (см.

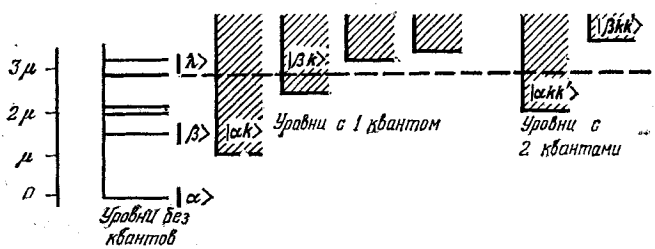


Рис. 24. Типичная схема расположения первых энергетических уровней оператора H_0.

том 1, рис. 36 и 37) высота уровней над основным состоянием равна разности их энергий и энергии основного состояния; как следствие, уровни с одинаковой энергией расположены на одной высоте. Уровни на рисунке расположены в соответствии со структурой собственных состояний. В левом столбце находятся уровни состояний без квантов. Затем идут несколько столбцов, отвечающих состояниям с одним квантом, каждый столбец соответствует определенному квантовому состоянию частицы. Первый отвечает уровням $|\alpha \boldsymbol{k}\rangle$; когда частица находится в основном состоянии, уровни заполняют непрерывную зону (в пределе $L \to \infty$), нижняя граница которой соответствует одному кванту с нулевым импульсом и, следовательно, удалена от уровня основного состояния $|\alpha\rangle$ на расстояние μ. Второй столбец отвечает состояниям $|\beta \boldsymbol{k}\rangle$, где частица находится в первом возбужденном состоянии, и так далее. После уровней с одним квантом следуют уровни с двумя квантами, расположенные в виде столбцов, каждый из которых соответствует определенному квантовому состоянию частицы, и так далее.

Возмущение H' связывает различные уровни. В определенном выше представлении H' задается особенно простой матрицей. Из формулы (66) видно, что *оператор H' имеет отличные*

от нуля матричные элементы только между базисными векторами, для которых число квантов отличается на единицу. Легко вычислить эти матричные элементы, пользуясь свойствами операторов рождения и уничтожения. Находим

$$\langle\lambda|\,H'\,|\,\nu\boldsymbol{k}\rangle = \langle\nu\boldsymbol{k}\,|\,H'\,|\,\lambda\rangle^* = (2\pi/L)^{3/2}\,g\,\frac{C(k)}{\sqrt{2\omega_k}}\,\langle\lambda\,|\,U(\boldsymbol{k})\,|\,\nu\rangle, \qquad (69а)$$

$$\langle\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\,|\,H'\,|\,\nu\boldsymbol{k}\rangle = \langle\nu\boldsymbol{k}\,|\,H'\,|\,\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle^* =$$

$$= (2\pi/L)^{3/2}\,g\,\frac{C(k)}{\sqrt{2\omega_k}}\,\langle\lambda\,|\,U^+(\boldsymbol{k}')\,|\,\nu\rangle, \qquad (\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}'). \qquad (69б)$$

(Если $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$, то в последнем выражении нужно добавить множитель $\sqrt{2}$.) Мы использовали обозначение

$$U(\boldsymbol{k}) = e^{i\boldsymbol{k}R}/(2\pi)^{3/2}. \qquad (70)$$

Независимо от того, насколько слабой является связь уровней, она ведет к качественному изменению спектра, поскольку большинство связанных состояний становятся неустойчивыми и частица может совершить *переходы* в состояния с меньшей энергией, излучая один или несколько квантов поля. Рассмотрим, например, изображенное на рис. 24 состояние $|\lambda\rangle$; оно расположено на том же уровне, что и некоторые состояния непрерывного спектра, а именно: состояния с одним квантом $|\alpha\boldsymbol{k}\rangle$ или $|\beta\boldsymbol{k}\rangle$ и состояния с двумя квантами $|\alpha\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle$. Введение малого возмущения H' связывает дискретные собственные состояния и состояния с одним квантом, состояния с одним квантом и состояния с двумя квантами и т. д. Следовательно, появляется возможность «радиационных» переходов из состояния $|\lambda\rangle$ в состояния непрерывного спектра, расположенные на том же уровне. Возможные переходы из состояния $|\lambda\rangle$ схематически изображены на рис. 25. Остаются устойчивыми только те связанные состояния, энергия которых в сравнении с энергией основного состояния достаточно мала и излучение кванта массы μ энергетически запрещено, т. е. состояния, энергия которых меньше $E_\alpha + \mu$. В примере на рис. 24 устойчивым является только основное состояние.

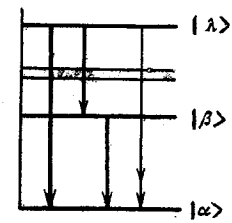


Рис. 25. Радиационные переходы с уровня $|\lambda\rangle$. Двойная стрелка справа соответствует переходу на основной уровень с испусканием двух квантов. Это переход более высокого порядка.

Появление в гамильтониане члена H' ведет также к сдвигу уровней связанных состояний. Как мы увидим, это эффект второго порядка. Тем не менее, он может влиять на устойчивость

различных состояний частицы, и моды «радиационных» переходов, поскольку даже малый сдвиг уровня может оказаться достаточным, чтобы сделать энергетически возможными некоторые «радиационные» переходы, которые были запрещены, или привести к обратной ситуации.

§ 11. Сдвиги уровней

В качестве первого приложения вычислим упоминавшиеся в конце предыдущего параграфа сдвиги уровней. Эти несложные вычисления по теории возмущений познакомят нас с основными трудностями теории поля, позволят понять физический смысл и границы применимости теории.

Рассмотрим устойчивый уровень, например, основное состояние, и вычислим порожденный членом H' сдвиг, пользуясь стационарной теорией возмущений. Для простоты будем считать уровень невырожденным. Поскольку свойства инвариантности H' и $H_{\text{част}}$ совпадают, то рассмотрение вырожденного уровня не имеет принципиальных различий. В первом порядке сдвиг определяется формулой (XVI. 12). Из свойств H' следует, что

$$\langle \alpha | H' | \alpha \rangle = 0,$$

и вычисления необходимо проводить во втором порядке. Пусть δE_α — поправка к энергии второго порядка, тогда имеем (см. § XVI. 6)

$$\delta E_\alpha = \langle \alpha | H' \frac{1}{E_\alpha - H_0} H' | \alpha \rangle. \tag{71}$$

Вычислим это выражение, используя определенное выше представление. Из промежуточных состояний вклад будут давать только состояния, содержащие один квант. Принимая во внимание соотношения (68), (69а) и (70), последовательно получаем

$$\delta E_\alpha = \sum_n \langle \alpha | H' | n \rangle \frac{1}{E_\alpha - E_n} \langle n | H' | \alpha \rangle =$$

$$= \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} | \langle \alpha | H' | \nu \boldsymbol{k} \rangle |^2 / (E_\alpha - E_\nu - \omega_k) =$$

$$= g^2 (2\pi/L)^3 \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} [(C^2(k)/2\omega_k) | \langle \alpha | U_k | \nu \rangle |^2 / (E_\alpha - E_\nu - \omega_k)].$$

Заменяя суммирование по $\boldsymbol{k}$ интегрированием согласно правилам, описанным в § 6, и используя обрезающую функцию (67), имеем

$$\delta E_\alpha = -g^2 \int\limits_{k \leqslant K} d\boldsymbol{k} \sum_\nu \frac{|\langle \alpha | U(\boldsymbol{k}) | \nu \rangle|^2}{2\omega (\omega + E_\nu - E_\alpha)}. \tag{72}$$

Отметим, что

$$\delta E_\alpha < 0.$$

Действительно, все слагаемые в правой части формулы (72) неотрицательны, так как речь идет об основном состоянии и $(\omega + E_\nu - E_\alpha) > 0$ для любого ν.

Чтобы получить оценку сверху для $|\delta E_\alpha|$, можно заменить величину $E_\nu - E_\alpha$ в знаменателе ее минимальным значением, т. е. нулем. Тогда суммирование по ν легко выполнить, используя соотношение полноты $\sum_\nu |\nu\rangle\langle\nu| = 1$. Поскольку $UU^\dagger = (2\pi)^{-3}$, сумма равна $(2\pi)^{-3}/2\omega^2$ и после интегрирования по углам имеем

$$|\delta E_\alpha| < (g^2/4\pi^2)\int_0^K (k^2/\omega^2)\,dk. \tag{73}$$

Интеграл в неравенстве (73) можно легко вычислить, и так как $K \gg \mu$, он лишь незначительно меньше K. Следовательно,

$$|\delta E_\alpha| < g^2K/4\pi^2. \tag{74}$$

Более точную оценку правой части формулы (72) можно получить следующим образом. Если воспользоваться соотношением полноты и заменить $U(\boldsymbol{k})$ согласно формуле (70), то получим

$$\delta E_\alpha = -\frac{g^2}{8\pi^3}\int\limits_{k\leqslant K} \langle\alpha|\, e^{i\boldsymbol{kR}}(\omega + H_{\text{част}} - E_\alpha)^{-1} e^{-i\boldsymbol{kR}}\,|\alpha\rangle \frac{d\boldsymbol{k}}{2\omega}. \tag{75}$$

Унитарный оператор $\exp(i\boldsymbol{kR})$ коммутирует с $\boldsymbol{R}$ и преобразует оператор $\boldsymbol{P}$ в $(\boldsymbol{P} - \boldsymbol{k})$. Следовательно,

$$e^{i\boldsymbol{kR}} H_{\text{част}} e^{-i\boldsymbol{kR}} = \frac{(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{k})^2}{2M} + V(R) = H_{\text{част}} + \frac{k^2}{2M} - \frac{\boldsymbol{Pk}}{M}$$

и

$$e^{i\boldsymbol{kR}}(\omega + H_{\text{част}} - E_\alpha)^{-1} e^{-i\boldsymbol{kR}} = \left(\omega + \frac{k^2}{2M} + H_{\text{част}} - E_\alpha - \frac{\boldsymbol{Pk}}{M}\right)^{-1}.$$

Подставляя это выражение в правую часть формулы (75), находим

$$\delta E_\alpha = -\frac{g^2}{8\pi^3}\int\limits_{k\leqslant K} \langle\alpha|\left(\omega + \frac{k^2}{2M} + H_{\text{част}} - E_\alpha - \frac{\boldsymbol{Pk}}{M}\right)^{-1}|\alpha\rangle \frac{d\boldsymbol{k}}{2\omega}.$$

Членом $\boldsymbol{Pk}/M$ в правой части можно пренебречь, поскольку среднее значение скорости частицы P/M в состоянии $|\alpha\rangle$ много меньше 1 (нерелятивистское приближение). В этом приближении после интегрирования по углам получаем

$$\delta E_\alpha \approx -\frac{g^2}{4\pi^2}\int_0^K \frac{k^2}{\omega^2}\left(1 + (k^2/2M\omega)\right)^{-1} dk \tag{76}$$

выражение, которое отличается от правой части неравенства (73) только множителем $(1+(k^2/2M\omega))^{-1}$ под знаком интеграла. Поскольку $\mu \ll K \approx M$, значение этого множителя меняется от 1 до 2/3 на промежутке интегрирования, и мы можем написать

$$\delta E_a = -sg^2K/4\pi^2, \quad (s \leqslant 1). \tag{77}$$

Фигурирующая в этой формуле константа s имеет значение между 2/3 и 1.

Для оценки этого эффекта вычислим порядок его величины в случае, когда различные параметры модели имеют численные значения того же порядка, что и встречающиеся в атомах [1]). Так, M равна массе электрона, g^2 — постоянная тонкой структуры

$$g^2 \approx 10^{-1}. \tag{78}$$

Пусть D/M — расстояние от рассматриваемого уровня до ближайшего соседнего уровня

$$D/M \approx 10^{-4} - 10^{-5}. \tag{79}$$

С данными числами

$$|\delta E_a/D| \approx g^2M/4\pi^2D \approx 100.$$

Таким образом, это очень сильный эффект, значительно превосходящий сдвиги, наблюдаемые экспериментально. Естественно, возникает вопрос о справедливости рассмотрения по теории возмущений и физическом смысле результата.

Однако разумное сравнение теории и эксперимента должно учитывать следующее. Масса M, которая фигурирует в вычислениях невозмущенных уровней, *не есть* экспериментально наблюдаемая масса. Последняя получается на основании измерений энергии и импульса «свободной» частицы, т. е. частицы вне потенциала $V(R)$. Такая «свободная» частица, тем не менее, взаимодействует с полем и, следовательно, измерение дает: $M_{\text{эксп}} = M + \delta M$, где δM представляет собой вклад в энергию покоя «свободной» частицы, порожденной наличием поля. В данном случае несложные вычисления дают $\delta M \approx -g^2K/4\pi^2$. Точнее, вычисление δM во втором порядке по теории возмущений приводит к правой части формулы (76) (задача 2). Следова-

[1]) В силу того, что вид взаимодействия в данном случае отличается от случая атома и электромагнитного поля, численные результаты скалярной теории не могут точно согласовываться с результатами квантовой теории излучения. Для того чтобы сравнивать соответствующие величины, константу g^2 фиксируют так, что значение вероятности дипольного перехода получается величиной того же порядка, что и вероятность дипольных переходов в атомах (см. (81) и (245)), т. е. $g^2/4\pi \approx 1/137$.

тельно, сдвиг δE_α почти полностью вызван «перенормировкой» массы [1]).

В вычислениях уровней атома водорода в теории Шредингера или Дирака фигурирует экспериментальная масса электрона. Таким образом, учитывается основная часть взаимодействия электрона с полем излучения, что объясняет замечательное согласие вычисленного спектра с наблюдаемым.

«Экспериментально наблюдаемый сдвиг» $\delta E'_\alpha$ равен разности между вычисленным сдвигом δE_α и сдвигом, порожденным заменой теоретического значения массы на экспериментальное («перенормированная» масса) в гамильтониане частицы. Для нашей модели подстановка «перенормированной» массы ведет к замене $H_{\text{част}}$ на

$$\delta M + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2(M+\delta M)} + V(R)$$

и к сдвигу всех уровней на величину δM. Тем самым, имеем

$$\delta E_\alpha^{(0)} = \delta M \left(1 - \langle \alpha \left| \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^2} \right| \alpha \rangle\right).$$

Если ограничиться вторым порядком теории возмущений, то вычисление $\delta E'_\alpha = \delta E_\alpha - \delta E_\alpha^{(0)}$ не представляет серьезных затруднений, и для $|\delta E'_\alpha / D|$ получается значение порядка 10^{-3}, что является разумным по порядку величины.

Тем не менее, к полученному значению $\delta E'_\alpha$ следует относиться с осторожностью, поскольку оно очень чувствительно к выбору обрезающей функции. Реалистические вычисления должны основываться на полностью релятивистской теории. В действительности мы встречаемся здесь с трудной проблемой квантовой теории поля, которая в настоящее время не имеет удовлетворительного решения. Взаимодействие в релятивистской теории является локальным, и для δM получается выражение вида: $\delta M = ZM$, где Z представляется расходящимся интегралом (см. предыдущую сноску). Точно так же δE_α и $\delta E_\alpha^{(0)}$ представляются расходящимися интегралами, так что выражение для $\delta E'_\alpha$ является неопределенностью типа $\infty - \infty$.

Несмотря на упомянутые ограничения, мы продолжим исследование нашей упрощенной модели, которая корректно описывает большое количество экспериментальных фактов. Такие эффекты как «перенормировка» массы, удовлетворительное рассмотрение которых возможно только в рамках ковариантного формализма, мы оставляем в стороне.

[1]) Считая $K \approx M$, получаем $\delta M/M \approx 10^{-3}$. Следовательно, относительное изменение массы мало, что оправдывает *a posteriori* использование теории возмущений. Однако если не вводить обрезающей функции, то δM выражается расходящимся интегралом. К этому вопросу мы еще вернемся.

§ 12. Излучение квантов

Вернемся к рассмотрению состояний частицы, которые являются нестабильными в силу взаимодействия H'.

В этом параграфе мы вычислим вероятности перехода в единицу времени для различных «радиационных переходов», пользуясь нестационарной теорией возмущений (§ XVII. 4).

Предположим для определенности, что спектр оператора H_0 совпадает со спектром, изображенным на рис. 24, и рассмотрим состояние $|\lambda\rangle$. Из этого состояния энергетически возможны только переходы в основное состояние с излучением одного или двух квантов ($3\mu > E_\lambda - E_\alpha > 2\mu$) и переходы в первое возбужденное состояние с излучением одного кванта ($2\mu > E_\lambda - E_\beta > \mu$). Ниже мы будем рассматривать только переходы с излучением одного кванта. Испускание двух квантов представляет собой процесс высшего порядка и при прочих равных условиях происходит в g^2 раз реже, чем испускание одного кванта. Поэтому, интересуясь только первым порядком теории возмущений, мы такие процессы рассматривать не будем.

Пусть частица первоначально находится в состоянии $|\lambda\rangle$. Тогда вероятность в единицу времени перехода частицы в состояние $|\alpha\rangle$ с излучением кванта в телесный угол $(\Omega, \Omega + d\Omega)$, т. е. вероятность в единицу времени перехода $\lambda \to \alpha\boldsymbol{k}$, где $\boldsymbol{k}$ — вектор в данном телесном угле, в первом порядке дается выражением (см. ур. (XVII. 50))

$$w_{\lambda \to \alpha k}\, d\Omega = 2\pi |\langle \lambda | H' | \alpha \boldsymbol{k}\rangle|^2 \rho_L(\omega)\, d\Omega, \tag{80}$$

в котором энергия кванта ω вычисляется из закона сохранения

$$\omega = \omega_{\lambda\alpha} \equiv E_\lambda - E_\alpha.$$

Принимая во внимание соотношения (49), (69а) и (70), из формулы (80) получаем

$$w_{\lambda \to \alpha k} = 2\pi g^2 \frac{|\langle \lambda | e^{i\boldsymbol{k}R} | \alpha\rangle|^2}{2\omega} \frac{\omega k}{(2\pi)^3} = \frac{g^2 k}{8\pi^2} |\langle \lambda | e^{i\boldsymbol{k}R} | \alpha\rangle|^2. \tag{81}$$

Интегрируя по углам, получаем вероятность перехода в единицу времени из состояния λ в α, которую мы обозначим $\Gamma_{\lambda\to\alpha}$:

$$\Gamma_{\lambda\to\alpha} \equiv \int w_{\lambda\to\alpha}\, d\Omega = \frac{g^2 k}{8\pi^2} \int |\langle \lambda | e^{i\boldsymbol{k}R} | \alpha\rangle|^2 d\Omega. \tag{82}$$

Аналогичные выражения можно получить для переходов в состояние β. Полная вероятность перехода в единицу времени Γ_λ равна

$$\Gamma_\lambda = \Gamma_{\lambda\to\alpha} + \Gamma_{\lambda\to\beta}. \tag{83}$$

Величина Γ_λ обратна *времени жизни* состояния $|\lambda\rangle$, что можно увидеть из следующих полуклассических рассуждений. Рассмотрим статистический ансамбль частиц и обозначим $N_\lambda(t)$ число частиц в состоянии $|\lambda\rangle$ в момент времени t. Число частиц, участвующих в радиационном переходе в интервале времени $(t, t+dt)$, равно $\Gamma_\lambda N_\lambda(t)\,dt$. Следовательно,

$$N_\lambda(t+dt) = (1 - \Gamma_\lambda\, dt)\, N_\lambda(t)$$

или

$$\frac{dN_\lambda}{dt} = -\Gamma_\lambda N_\lambda$$

и

$$N_\lambda(t) = N_\lambda(0)\exp(-\Gamma_\lambda t). \tag{84}$$

Это хорошо известный *экспоненциальный закон* распада, и время жизни равно $1/\Gamma_\lambda$. В рассмотренном нами случае имеется две моды распада, $\lambda \to \alpha$ и $\lambda \to \beta$, и отношение первой ко второй равно $\Gamma_{\lambda\to\alpha}/\Gamma_{\lambda\to\beta}$.

Ясно, что приведенные полуклассические рассуждения не могут считаться доказательством экспоненциального закона, поскольку вычисление вероятностей перехода по теории возмущений оправдано только для $\Gamma_\lambda t \ll 1$ (см. обсуждение в конце § XVII. 4), т. е. для достаточно малых t, пока вектор состояния мало отличается от начального. Для больших времен требуется более глубокий анализ, который будет проделан в § 13.

Чтобы определить Γ по порядку величины, вернемся к обозначениям и численным данным § 11. Для не слишком больших энергий возбуждения имеем $k \approx D$ и, поскольку размеры $\langle R\rangle$ области, где сосредоточена волновая функция, порядка $(2MD)^{-1/2}$, получаем

$$k\langle R\rangle \approx (D/2M)^{1/2} \approx 5\cdot 10^{-3} \ll 1.$$

Величину $\langle\lambda|\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}}\,|\alpha\rangle$ можно оценить, заменив экспоненту первым членом ряда Тейлора, который дает отличный от нуля вклад (длинноволновое приближение); порядок этого члена определяется в основном правилами отбора по моменту импульса. В наиболее благоприятной ситуации (дипольные переходы) имеем

$$|\langle\lambda|\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}}\,|\alpha\rangle| \approx |\langle\lambda|\,\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}\,|\alpha\rangle| \approx k\langle R\rangle,$$

откуда

$$\Gamma_{\lambda\to\alpha} \approx \frac{g^2 k}{2\pi}(k\langle R\rangle)^2 \approx 10^{-6} D.$$

Если взять это же значение для величины Γ_λ, то получим время жизни $1/\Gamma_\lambda$, значительно превосходящее (в 10^6 раз) характерный период $1/D$ движения частицы во внешнем потенциале. Следовательно, разумно рассматривать, что и было сделано выше, взаимодействие H', которое ответственно за излучение кванта, как малое возмущение.

Можно получить формально очень простое и общее выражение для Γ_λ, исходя непосредственно из формулы (80) и ис-

пользуя определение плотности уровней, закон сохранения энергии и соотношение полноты. Последовательно имеем [1])

$$\Gamma_\lambda = 2\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_\nu \int d\boldsymbol{k}\, |\langle \lambda | H' | \nu \boldsymbol{k}\rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_\nu - \omega) =$$

$$= 2\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_\nu \int d\boldsymbol{k}\, \langle \lambda | H' \delta(E_\lambda - H_\nu) | \nu \boldsymbol{k}\rangle \langle \nu \boldsymbol{k} | H' | \lambda\rangle =$$

$$= 2\pi \langle \lambda | H' \delta(E_\lambda - H_0) H' | \lambda\rangle. \tag{85}$$

Полученное выражение будет использоваться в дальнейшем.

§ 13. Квантовая теория распадающихся состояний. Ширина линии

В этом параграфе мы используем квантовую теорию для анализа точной зависимости от времени распадающихся квазистационарных состояний. Мы покажем, что результаты, которые были получены в § 12 с помощью упрощенных рассуждений, в существенном не меняются, и, в частности, распад с очень хорошим приближением имеет экспоненциальный характер. Будут введены также такие важные понятия, как сдвиг уровня и ширина линии.

Предположим, что в начальный момент времени $t = 0$ система находилась в связанном состоянии, отвечающем собственному значению E_λ гамильтониана H_0, и рассмотрим изменение этого состояния с течением времени.

До сих пор мы считали собственное значение E_λ невырожденным. Это упрощение потребуется нам при обсуждении результатов, однако приводимые ниже рассуждения применимы также и к случаю вырожденного собственного значения. Обозначим $\mathscr{E}_\lambda$ подпространство, натянутое на векторы, которые описывают связанные состояния, отвечающие собственному значению E_λ. Пусть P_λ и Q_λ — проекторы на $\mathscr{E}_\lambda$ и его ортогональное дополнение соответственно

$$H_0 P_\lambda = P_\lambda H_0 = E_\lambda P_\lambda, \quad P_\lambda + Q_\lambda = 1.$$

Оператор эволюции, как обычно, имеет вид

$$U(t) = e^{-iHt}, \tag{86}$$

[1]) Выражение (85) возникает во многих задачах. Оно представляет собой общее выражение для вероятности перехода в единицу времени в первом порядке теории возмущений и его можно вывести согласно общей теореме § XVII. 4 из формулы (XVII. 40), используя для фигурирующей в этой формуле функции f асимптотический вид (XVII. 43).

и наша задача состоит в вычислении для $t > 0$ величины $P_\lambda U(t) P_\lambda$.

Введем резольвенту оператора H

$$G(z) \equiv \frac{1}{z - H}, \tag{87}$$

сингулярности которой как функции комплексной переменной z совпадают со спектром H (дискретному спектру соответствуют полюса, а непрерывному спектру — разрез). Справедливо равенство [1])

$$U(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixt} [G(x^+) - G(x^-)]\, dx, \quad (x^\pm \equiv x \pm i\varepsilon). \tag{88}$$

Операторы $\mathcal{U}$ и $\mathcal{G}$, определенные в пространстве $\mathcal{E}_\lambda$ соотношениями

$$\mathcal{U}(t) = P_\lambda U(t) P_\lambda, \quad \mathcal{G}(z) = P_\lambda G(z) P_\lambda, \tag{90}$$

связаны по формуле

$$\mathcal{U}(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixt} [\mathcal{G}(x^+) - \mathcal{G}(x^-)]\, dx, \quad (x^\pm \equiv x \pm i\varepsilon). \tag{91}$$

Чтобы получить удобное для работы выражение для $\mathcal{G}(z)$, воспользуемся соотношениями:

$$H = H_1 + H'',$$
$$H_1 \equiv P_\lambda H P_\lambda + Q_\lambda H Q_\lambda = H_0 + Q_\lambda H' Q_\lambda,$$
$$H'' \equiv P_\lambda H Q_\lambda + Q_\lambda H P_\lambda = P_\lambda H' Q_\lambda + Q_\lambda H' P_\lambda.$$

---

[1]) Соотношение (88) непосредственно следует из формулы *)

$$G(x^\pm) \equiv \frac{1}{x - H \pm i\varepsilon} = v.\,P.\,\frac{1}{x - H} \mp i\pi\delta(x - H), \tag{89}$$

которая справедлива для бесконечно малого положительного ε (см. ур. (А.15д)). Отметим, что при $t > 0$ вклад $G(x^-)$ в интеграл в правой части соотношения (88) равен нулю. Более общие формулы, связывающие $U(t)$ и $G(z)$, имеют вид

$$G(z) = -i \int_0^{\eta\infty} e^{izt} U(t)\, dt, \quad U(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{-izt} G(z)\, dz,$$

где η — знак $\operatorname{Im} z$, C — контур в комплексной плоскости z, идущей из $\infty + i\varepsilon$ в $\infty - i\varepsilon$, по отношению к которому спектр H лежит слева. Эти формулы легко вывести в представлении, где оператор H диагонален.

*) Символ *v. P.* означает, что интеграл с этим ядром понимается в смысле главного значения. (*Прим. перев.*)

Заметим, что

$$H_1 P_\lambda = P_\lambda H_1 = E_\lambda P_\lambda, \quad [Q_\lambda, H_1] = 0,$$
$$P_\lambda H'' = H'' Q_\lambda, \qquad Q_\lambda H'' = H'' P_\lambda.$$

Из этих соотношений и операторного тождества

$$(A-B)^{-1} \equiv A^{-1} + A^{-1} B (A-B)^{-1}$$

следуют равенства

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_1} + \frac{1}{z-H_1} H'' \frac{1}{z-H} = \tag{92}$$

$$= \frac{1}{z-H_1} + \frac{1}{z-H_1} H'' \frac{1}{z-H_1} + \frac{1}{z-H_1} H'' \frac{1}{z-H_1} H'' \frac{1}{z-H}$$

(93)

$$P_\lambda \frac{1}{z-H} P_\lambda = \frac{P_\lambda}{z-E_\lambda} + \frac{1}{z-E_\lambda} \left(P_\lambda H'' \frac{1}{z-H_1} H'' P_\lambda \right) P_\lambda \frac{1}{z-H} P_\lambda \tag{94}$$

Формула (94) представляет собой соотношение между операторами, действующими в пространстве $\mathcal{E}_\lambda$, а именно

$$\mathcal{G}(z) = \frac{1}{z-E_\lambda} [1 + \mathcal{W}(z) \mathcal{G}(z)], \tag{95}$$

где

$$\mathcal{W}(z) \equiv P_\lambda H'' \frac{1}{z-H_1} H'' P_\lambda = P_\lambda H' Q_\lambda \frac{1}{z - Q_\lambda H Q_\lambda} Q_\lambda H' P_\lambda. \tag{96}$$

Из уравнения (95) получаем

$$\mathcal{G}(z) = \frac{1}{z - E_\lambda - \mathcal{W}(z)}. \tag{97}$$

Выражения (96), (97) и (91) представляют собой точные соотношения, которые могут служить основой для вычисления $\mathcal{U}(t)$.

Формулы (96) и (97) определяют $\mathcal{W}(z)$ и $\mathcal{G}(z)$ как функции комплексной переменной z в плоскости с разрезом вдоль непрерывного спектра H. Нас будет интересовать поведение этих функций в окрестности разреза. Используя соотношение (89), выпишем отдельно эрмитову и антиэрмитову части $\mathcal{W}(x^\pm)$, т. е.

$$\mathcal{W}(x^\pm) = \Delta(x) \mp \frac{1}{2} i \Gamma(x), \tag{98}$$

$$\Delta(x) \equiv P_\lambda H' v.\,p. \frac{1}{x - Q_\lambda H Q_\lambda} H' P_\lambda, \tag{99}$$

$$\Gamma(x) \equiv 2\pi P_\lambda H' \delta(x - Q_\lambda H Q_\lambda) H' P_\lambda. \tag{100}$$

Отметим, что $\Gamma(x)$ — положительно определенный эрмитов оператор.

В дальнейшем будем предполагать, что собственное значение E_λ оператора H_0 невырождено [1]).

По предположению система в начальный момент времени $t = 0$ находилась в состоянии $|\lambda\rangle$. Требуется определить состояние системы в момент времени t

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)\,|\lambda\rangle \tag{101}$$

и, в частности, проекцию этого состояния на вектор $|\lambda\rangle$.

Всюду ниже операторы $\mathcal{U}(t), \mathcal{G}(z), \mathcal{W}(z), \Delta(x)$ и $\Gamma(x)$ можно заменить их средними значениями по состоянию $|\lambda\rangle$ и рассматривать как числовые функции своих аргументов. Определения (90), (99) и (100) перейдут в

$$\mathcal{U}(t) \equiv \langle\lambda\,|\,U(t)\,|\,\lambda\rangle, \quad \mathcal{G}(z) \equiv \langle\lambda\,|\,G(z)\,|\,\lambda\rangle, \tag{102}$$

$$\Delta(x) \equiv \langle\lambda\,|\,H'v.\,P.\left(\frac{1}{x - Q_\lambda H Q_\lambda}\right)H'\,|\,\lambda\rangle, \tag{103}$$

$$\Gamma(x) \equiv 2\pi\,\langle\lambda\,|\,H'\delta(x - Q_\lambda H Q_\lambda)\,H'\,|\,\lambda\rangle, \tag{104}$$

а из уравнений (97) и (91) получаем

$$\mathcal{G}(x^\pm) = \left[x - E_\lambda - \Delta(x) \pm \tfrac{1}{2}\,i\Gamma(x)\right]^{-1}, \tag{105}$$

$$\mathcal{U}(t) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt}F(x)\,dx, \tag{106}$$

где

$$F(x) \equiv i\,(\mathcal{G}(x^+) - \mathcal{G}(x^-)) = \frac{\Gamma(x)}{(x - E_\lambda - \Delta(x))^2 + \frac{1}{4}\,\Gamma(x)^2}. \tag{107}$$

---

[1]) В большинстве случаев вырождение E_λ связано с симметрией H_0, которая не нарушается при добавлении взаимодействия H'. Например, при радиоактивном распаде ядра со спином J вырождение кратности $2J + 1$ связано с инвариантностью относительно вращений, которая сохраняется при включении взаимодействия, ответственного за распад. Поскольку в этом случае $\mathcal{E}_\lambda$ — неприводимое подпространство, а операторы $\mathcal{W}(z)$, $\mathcal{G}(z)$ и $\mathcal{U}(t)$ инвариантны, то эти операторы в пространстве $\mathcal{E}_\lambda$ пропорциональны единичному оператору и их вычисление проводится точно так же, как и в невырожденном случае. Все состояния из $\mathcal{E}_\lambda$ описывают один и тот же закон радиоактивного распада с определенным временем жизни и сдвигом уровня.

С другой стороны, если эти условия симметрии не выполняются, то могут возникнуть несколько времен жизни и несколько сдвигов. Эта ситуация имеет место для первого возбужденного уровня атома водорода (см. обсуждение лэмбовского сдвига в конце § XX. 27). В качестве другого примера укажем K^0-мезон. Рассмотрение общего случая по существу можно провести аналогично. Воспользовавшись тем же приближением для $\mathcal{U}(t)$, получаем

$$\mathcal{U}(t) \approx \exp\left[-i\left(E_\lambda + \mathcal{W}\left(E_\lambda^+\right)\right)t\right],$$

что является обобщением выражения (109). Вещественная и мнимая части собственных значений неэрмитова оператора $\mathcal{W}\left(E_\lambda^+\right)$ определяют сдвиги и соответствующие времена жизни.

До сих пор мы не пользовались какими-либо приближениями. Для вычисления $F(x)$ и $\mathcal{U}(t)$ будем предполагать взаимодействие слабым и в выражениях (103) и (104) оставим только члены младшего порядка по H'. Это сводится к замене $Q_\lambda H Q_\lambda$ на H_0, после чего величины $\Delta(x)$ и $\Gamma(x)$ легко вычисляются. Форма $\Gamma(x)$ приведена на рис. 26. При достаточно малых $\Delta(x)$ и $\Gamma(x)$ функция $F(x)$ имеет четко выраженный максимум около точки $x = E_\lambda$, и наибольший вклад в интеграл (106) дает окрестность этой точки. Следовательно, можно оценить этот интеграл, подставляя вместо медленно меняющихся функций $\Delta(x)$ и $\Gamma(x)$ их значения в точке $x = E_\lambda$

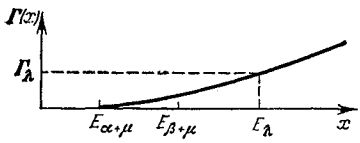


Рис. 26. Общий вид функции $\Gamma(x)$. Заметим, что $\Gamma(x) = 0$ при $x < E_\alpha + \mu$.

$$\Delta(E_\lambda) \equiv \delta E_\lambda, \quad \Gamma(E_\lambda) \equiv \Gamma_\lambda, \tag{108}$$

что сводится к замене функции $F(x)$ (см. рис. 27) на функцию

$$F_1(x) = \frac{\Gamma_\lambda}{(x - E_\lambda - \delta E_\lambda)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_\lambda^2}.$$

На рис. 27 для функций Δ и Γ использовалась зависимость от x, типичная для дипольных переходов

$$\Delta(x) \approx \text{const} = \delta E_\lambda, \quad \frac{\Gamma(x)}{\Gamma_\lambda} \approx \frac{(x - E_\lambda + \xi)^3}{\xi^3} \quad (\xi = E_\lambda - E_\alpha - \mu)$$

и следующие значения $\delta E_\lambda/\xi = 0{,}2$, $\Gamma_\lambda/\xi = 0{,}1$.

Ошибка при вычислении $\mathcal{U}(t)$ не превосходит величины

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} |F(x) - F_1(x)|\,dx.$$

При Γ_λ и δE_λ достаточно малых по сравнению с $E_\lambda - E_\alpha - \mu$ и $E_\lambda - E_\beta - \mu$ вне области больших времен ($t \gg 1/\Gamma_\lambda$) эта величина пренебрежимо мала относительно $\mathcal{U}(t)$.

После упомянутой выше замены интегрирование проводится несложно и дает в результате

$$\mathcal{U}(t) \approx \exp\left[-i(E_\lambda + \delta E_\lambda)t - \frac{1}{2}\Gamma_\lambda t\right]. \tag{109}$$

Следовательно,

$$|\mathcal{U}(t)|^2 = e^{-\Gamma_\lambda t}, \tag{110}$$

и мы получили экспоненциальный закон распада [1]).

[1]) Более строгое рассмотрение приводит к наличию дополнительных неэкспоненциальных членов в законе распада. Из работы: *Н. С. Крылов, В. А. Фок.* ЖЭТФ **17**, 93 (1947) — следует, что амплитуда распада полностью определяется энергетическим спектром начального состояния. (*Прим. перев.*)

Величина $1/\Gamma_\lambda$ — *время жизни* — была сосчитана нами в § 12 (см. ур. (84), (85), (104) и (108)).

Как видно из формулы (109), взаимодействие H' привело к изменению временной зависимости для уровня λ, а именно,

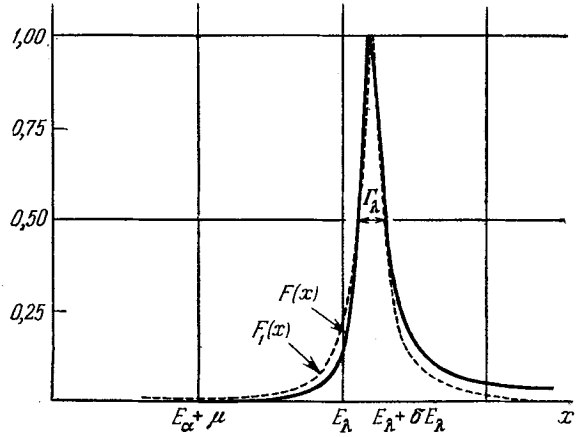


Рис. 27. Характерный вид функций $F(x)$ и $F_1(x)$. Функции Δ и Γ имеют энергетическую зависимость, типичную для дипольных переходов:

$$\Delta(E_\lambda+x)\approx \text{const}=\delta E_\lambda,\quad \frac{\Gamma(E_\lambda+x)}{\Gamma_\lambda}=\frac{(x+\xi)^3}{\xi^3}.$$

На рисунке $\delta E_\lambda/\xi=0{,}2$ и $\Gamma_\lambda/\xi=0{,}1$.

в показателе экспоненты к E_λ добавилась комплексная энергия

$$\delta E_\lambda-\frac{1}{2}i\Gamma_\lambda.$$

Вещественная часть δE_λ представляет собственно *сдвиг уровня*, и формула для нее аналогична формуле для сдвига уровня стационарного состояния (см. ур. (71), (103) и (108)). Характеризующая квазистационарное состояние мнимая часть равна, с точностью до знака, полуширине уровня и отвечает за экспоненциальный характер закона распада.

Вычислим другие компоненты состояния $|\Psi(t)\rangle$ в приближении слабой связи, когда отличны от нуля только проекции на состояния, содержащие один и только один квант

$$|\Psi(t)\rangle=\mathcal{U}(t)|\lambda\rangle+\sum_{\nu k}h_{\nu k}(t)|\nu k\rangle, \tag{111}$$

$$h_{\nu k}(t)=\langle\nu k|U(t)|\lambda\rangle. \tag{112}$$

Учитывая уравнения (92), имеем

$$\langle\nu k|G(z)|\lambda\rangle=\langle\nu k|(z-H_1)^{-1}H''|\lambda\rangle\mathcal{G}(z).$$

Это точное уравнение. Приближение слабой связи состоит в замене H_1 на H_0 в знаменателе, что дает

$$\langle \nu \boldsymbol{k} | G(z) | \lambda \rangle = \langle \nu \boldsymbol{k} | H' | \lambda \rangle (z - \omega - E_\nu)^{-1} \mathcal{G}(z).$$

Зная приближенное значение матричного элемента $G(z)$, получаем приближенное значение соответствующего матричного элемента $U(t)$. Для этого используется формула (88), интеграл в которой можно взять по вычетам. Для достаточно больших t главный вклад дает полюс на вещественной оси, и мы имеем

$$h_{\nu \boldsymbol{k}}(t) \approx \langle \nu \boldsymbol{k} | H' | \lambda \rangle \left. \frac{e^{-ixt}}{x - E_\lambda - \Delta(x) + \frac{1}{2} i\Gamma(x)} \right|_{x=\omega+E_\nu} \qquad (\Gamma t \gg 1).$$

Квадрат модуля этого выражения равен вероятности обнаружить систему в состоянии $(\nu \boldsymbol{k})$ при больших по сравнению с временем жизни значениях времен t. Квадрат модуля можно записать в виде

$$|h_{\nu k}(\infty)|^2 = |\langle \nu \boldsymbol{k} | H' | \lambda \rangle|^2 \frac{F(\omega + E_\nu)}{\Gamma(\omega + E_\nu)}, \qquad (113)$$

где функция $F(x)$ определена формулой (107). Квадрат модуля $|h_{\nu k}(\infty)|^2$, в силу указанных выше свойств функции $F(x)$ (см. рис. 27), близок к нулю вне окрестности точки $\omega + E_\nu \approx E_\lambda$, т. е. наблюдаемые переходы в основном сохраняют невозмущенную энергию. Для таких переходов — в рассматриваемом здесь примере это переходы с $\nu = \alpha$ и $\nu = \beta$ — мы можем заменить $F(x)$ на $F_1(x)$. Таким образом, для переходов $\lambda \to \alpha \boldsymbol{k}$ мы получаем формулу

$$|h_{\alpha k}(\infty)|^2 = \frac{|\langle \alpha \boldsymbol{k} | H' | \lambda \rangle|^2}{(\omega + E_\alpha - E_\lambda - \delta E_\lambda)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_\lambda^2}. \qquad (114)$$

Следовательно, распределение энергии квантов, испущенных в этом переходе, подчиняется *закону Лоренца с шириной* Γ_λ и центром в точке $E_\lambda + \delta E_\lambda - E_\alpha$, т. е. положение максимума распределения совпадает с боровской частотой перехода при учете *сдвига* δE_λ.

Таким образом, ширина линии испущенных в радиационном переходе квантов равна величине, обратной к времени жизни (в системе единиц, где $\hbar = 1$), в соответствии с соотношением неопределенности энергия — время.

Необходимо сделать несколько замечаний о применимости полученных результатов.

Прежде всего при сравнении закона распределения (114) с данными опыта необходимо указать, как можно эксперимен-

тально приготовить состояние $|\lambda\rangle$. Мы вернемся к этому вопросу в § 15.

Кроме этого, приведенное рассмотрение имеет довольно существенные ограничения. Если воспользоваться численными результатами § 11, то мы увидим, что δE_λ является величиной того же порядка, что и δE_α, и, следовательно, значительно превосходит расстояние между уровнями. Однако если обозначить $\delta E_\lambda^{(0)}$ вклад, связанный с перенормировкой массы, то можно показать, что разность

$$\delta E'_\lambda \equiv \delta E_\lambda - \delta E_\lambda^{(0)}$$

является малой поправкой по сравнению с расстоянием между уровнями. Это затруднение в точности совпадает с тем, которое обсуждалось в § 11, и приведенные там рассуждения можно дословно повторить здесь.

Наконец, и это, очевидно, связано с приближением слабого взаимодействия при вычислении амплитуд $h_{\nu k}$, мы не учитывали сдвиги уровней, на которые происходит переход, и *a fortiori* тот факт, что некоторые из этих уровней из-за взаимодействия H' сами могут стать квазистационарными.

Для переходов на стационарные уровни или на уровни, время жизни которых больше времени жизни начального состояния, формула (114) корректна при учете упомянутых выше эффектов. Если обозначить $E_\alpha^{(0)}, \ldots, E_\lambda^{(0)}, \ldots$ уровни, которые получаются при замене в гамильтониане $H_{\text{част}}$ параметра M на экспериментально наблюдаемое значение массы, то корректная формула запишется в виде

$$|h_{\nu k}|^2_{\text{корр}} = \frac{|\langle \alpha k | H' | \lambda \rangle|^2}{\left(\omega + E_\alpha^{(0)} + \delta E'_\alpha - E_\lambda^{(0)} - \delta E'_\lambda\right)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_\lambda^2}. \qquad (114')$$

Результаты, вычисленные по этой формуле, находятся в отличном согласии с экспериментальными данными.

§ 14. Упругое рассеяние. Дисперсионная формула

В заключение этого раздела рассмотрим несколько простых задач о столкновении.

Первой задачей будет вычисление сечения упругого рассеяния кванта поля на частице, находящейся в основном состоянии. Пусть $\boldsymbol{k}_i$ — волновой вектор налетающего кванта, а $\boldsymbol{k}_f$ — вектор той же длины, указывающий направление, в котором квант наблюдается после столкновения. Таким образом, нас интересует процесс

$$i \to f \equiv (\alpha \boldsymbol{k}_i) \to (\alpha \boldsymbol{k}_f).$$

Положим

$$k_i = k_f = k, \quad \omega_i = \omega_f = \omega,$$

и обозначим E начальную энергию системы

$$E = \omega + E_\alpha. \tag{115}$$

Общая формула для сечения имеет вид

$$\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\text{падающий поток}} |T_{i\to f}|^2 \rho_f(E), \tag{116}$$

где $T_{i\to f}$ — амплитуда перехода

$$T_{i\to f} \equiv \langle f | T | i \rangle = \langle \alpha \boldsymbol{k}_f | T | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle, \tag{117}$$

$$T = H' + H' \frac{1}{E - H + i\varepsilon} H'. \tag{118}$$

Падающий поток равен произведению начальной скорости k/ω на плотность квантов в состоянии $|\alpha \boldsymbol{k}_i\rangle$, что с учетом принятой нормировки дает $L^{-3}k/\omega$. Величина $\rho_f(E)$ есть плотность конечных состояний с энергией E (см. ур. (49)). Таким образом, получаем

$$\frac{2\pi\rho_f(E)}{\text{падающий поток}} = \frac{L^6\omega^2}{4\pi^2},$$

$$\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega} = \frac{L^6\omega^2}{4\pi^2} |T_{i\to f}|^2. \tag{119}$$

При этом мы неявно предполагали, что в рассматриваемом случае применимы все основные формулы теории рассеяния. Так, уравнения (116) и (118) совпадают с уравнениями (XIX. 115) и (XIX. 144) соответственно. Незначительные отличия связаны с выбором обозначений, системы единиц и условий нормировки волновых функций, участвующих в определении амплитуды перехода.

Однако использование этих формул в интересующем нас случае не совсем корректно. При выводе формул предполагалось, что эволюция системы до и после столкновения почти точно описывается гамильтонианом H_0, а оператором взаимодействия можно пренебречь. Такое предположение было оправданным в главах X и XIX, но оно не выполняется здесь.

Рассмотрим, например, состояние системы до столкновения. Частица находится в основном состоянии, а квант описывается волновым пакетом, который движется по направлению к частице. Волновой пакет еще не достиг области в окрестности начала координат, где находится частица. Следовательно, на первый взгляд представляется, что ситуация не отличается от имеющейся в обычной теории рассеяния: взаимодействие кванта с частицей пренебрежимо мало, и движение кванта свободно. Однако оператором H' пренебречь нельзя, поскольку частица, даже находясь достаточно далеко от налетающего кванта, взаимодействует с полем. Поэтому ее начальное состояние не совпадает с собственным состоянием $|\alpha\rangle$ гамильтониана H_0, отвечающим энергии E_α, а является собственным состоянием $|\tilde{\alpha}\rangle$ гамильтониана H. Соответствующая со-

стоянию $|\tilde{\alpha}\rangle$ энергия $E_\alpha + \delta E_\alpha$ была вычислена в § 11, и состояние $|\tilde{\alpha}\rangle$ совпадает с $|\alpha\rangle$ только в пределе $g \to 0$.

Точная теория должна учитывать отличие «физического состояния» $|\tilde{\alpha}\rangle$, от невозмущенного состояния $|\alpha\rangle$. Если взаимодействие достаточно мало, то это отличие в основном сводится к эффекту перенормировки массы, не влияя на процесс рассеяния [1]).

В этом случае применимы обычные формулы теории рассеяния, но с заменой массы M в определении невозмущенного гамильтониана на экспериментально измеряемую массу $M + \delta M$.

Для вычисления сечения рассеяния будем рассматривать H' как возмущение, и заменим оператор T борновским разложением (см. ур. (XIX. 143)). Так как амплитуда в первом порядке равна нулю, то имеем

$$\langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle = 0,$$

и необходимо учитывать второй порядок по H'. Амплитуду во втором порядке обозначим

$$T^{(B)}_{i \to f} \equiv \langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle = \tag{120}$$

$$= \sum_n \langle \alpha \boldsymbol{k}_f | H' | n \rangle \frac{1}{E - E_n + i\varepsilon} \langle n | H' | \alpha \boldsymbol{k}_i \rangle. \tag{120'}$$

Суммирование во второй строке происходит по всем базисным векторам гамильтониана H_0. Благодаря специфике оператора H' большинство слагаемых в сумме исчезает. Виртуальные состояния, вклад которых отличен от нуля, можно разделить на две категории:

(i) состояния без квантов $|\nu\rangle$;

(ii) состояния $|\nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f\rangle$, содержащие два кванта с импульсами $\boldsymbol{k}_i$ и $\boldsymbol{k}_f$ соответственно.

Первые состояния отвечают переходам

$$(\alpha \boldsymbol{k}_i) \to (\nu) \to (\alpha \boldsymbol{k}_f),$$

в которых частица поглощает налетающий квант прежде, чем испустит квант конечного состояния; вторые отвечают переходам

$$(\alpha \boldsymbol{k}_i) \to (\nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f) \to (\alpha \boldsymbol{k}_f),$$

в которых квант конечного состояния излучается прежде, чем произойдет поглощение налетающего кванта.

Введя частоты Бора

$$\omega_{\nu\alpha} = E_\nu - E_\alpha \quad (> 0), \tag{121}$$

[1]) В высших порядках необходимо учитывать модификацию взаимодействия между налетающим квантом и частицей, что связано с наличием окружающих частицу виртуальных квантов. Эта модификация в существенном сводится к изменению константы взаимодействия («перенормировка заряда»).

получаем

$$T_{i\to f}^{(B)} = \sum_{\nu}\left[\frac{\langle \alpha \boldsymbol{k}_f \mid H' \mid \nu\rangle\langle \nu \mid H' \mid \alpha \boldsymbol{k}_i\rangle}{\omega - \omega_{\nu\alpha}} - \right.$$

$$\left. - \frac{\langle \alpha \boldsymbol{k}_f \mid H' \mid \nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f\rangle\langle \nu \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f \mid H' \mid \alpha \boldsymbol{k}_i\rangle}{\omega + \omega_{\nu\alpha}}\right]. \quad (122)$$

Воспользовавшись равенствами (69) и (70), в которых мы считаем $C(k) = 1$ (что является обоснованным, если $k \ll M$), находим

$$T_{i\to f}^{(B)} = \frac{L^{-3}g^2}{2\omega}\sum_{\nu}\left[\frac{X_\nu}{\omega - \omega_{\nu\alpha}} - \frac{X'_\nu}{\omega + \omega_{\nu\alpha}}\right], \quad (123)$$

где

$$X_\nu \equiv \langle \alpha \mid e^{-i\boldsymbol{k}_f R} \mid \nu\rangle\langle \nu \mid e^{i\boldsymbol{k}_i R} \mid \alpha\rangle, \quad (124)$$

$$X'_\nu \equiv \langle \alpha \mid e^{i\boldsymbol{k}_i R} \mid \nu\rangle\langle \nu \mid e^{-i\boldsymbol{k}_f R} \mid \alpha\rangle. \quad (124')$$

Подстановка полученного выражения в правую часть формулы (119) дает сечение рассеяния во втором порядке борновского приближения

$$\frac{d\sigma_{i\to f}^{(B)}}{d\Omega} = \frac{g^4}{16\pi^2}\left|\sum_{\nu}\left(\frac{X_\nu}{\omega - \omega_{\nu\alpha}} - \frac{X'_\nu}{\omega + \omega_{\nu\alpha}}\right)\right|^2. \quad (125)$$

Каждое слагаемое в этой сумме отвечает вкладу одного из упомянутых выше переходов. Этот вклад возрастает с уменьшением разности энергии системы и энергии виртуального состояния, которое соответствует этому переходу. При совпадении этих энергий вклад становится бесконечно большим. Для каждого перехода первой категории существует одно значение ω, когда промежуточное состояние может распасться на частицу в основном состоянии и излученный квант.

При переходе энергии ω через одно из таких критических значений, например, $E_\lambda(\omega_{\lambda\alpha} > \mu)$, знаменатель $\omega - \omega_{\lambda\alpha}$ обращается в нуль и меняет знак, слагаемое $X_\lambda/(\omega - \omega_{\lambda\alpha})$ неограниченно растет и выражение для сечения расходится. Борновское приближение в этой области становится неприменимым [1])

[1]) В длинноволновом пределе $(k\langle R\rangle \ll 1)$ имеем $|X_\lambda| \approx (k\langle R\rangle)^2$. Обозначив $\Delta\omega = |E - E_\lambda|$ и сохранив только вклад главного члена, из выражения (125) получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{g^4}{16\pi^2}\left(\frac{k^2\langle R\rangle^2}{\Delta\omega}\right)^2.$$

Согласно известному критерию (§ XIX. 7) борновское приближение не применимо, когда полное сечение является величиной одного порядка с геометриче-

независимо от малости значения константы связи. В действительности, сечение остается конечным, но имеет в этой точке четкий максимум. Как мы увидим ниже, здесь имеет место резонансное явление, аналогичное тому, которое исследовалось нами в главе X (§ 14—16).

§ 15. Резонансное рассеяние. Образование метастабильного состояния

Для вычисления сечения упругого рассеяния в окрестности одной из критических энергий, например E_λ, вернемся к точному выражению для амплитуды перехода. Согласно определениям (117) и (118)

$$\langle f|T|i\rangle = \sum_{n,\,n'} \langle f|H'|n\rangle \langle n|\frac{1}{E-H+i\varepsilon}|n'\rangle \langle n'|H'|i\rangle. \quad (126)$$

Борновское приближение состоит в замене в каждом члене этого разложения точной функции Грина $(E-H+i\varepsilon)^{-1}$ на функцию Грина $(E-H_0+i\varepsilon)^{-1}$ невозмущенного оператора (см. ур. (120) и (120′)). Если константа связи достаточно мала, то такое приближение оправдано для всех слагаемых, за исключением члена с $n=\lambda$ и $n'=\lambda$, для которого множитель $\langle\lambda|(E-H_0+i\varepsilon)^{-1}|\lambda\rangle$ неограниченно возрастает при стремлении энергии к E_λ. Обозначим слагаемое, характеризующее резонанс

$$A^{(\text{рез})} \equiv \langle f|H'|\lambda\rangle \langle\lambda|\frac{1}{E-H+i\varepsilon}|\lambda\rangle \langle\lambda|H'|i\rangle, \quad (127)$$

а остаток, связанный с потенциалом рассеяния, $A^{(\text{пот})}$, т. е.

$$\langle f|T|i\rangle \equiv A^{(\text{рез})} + A^{(\text{пот})}. \quad (128)$$

Для вычисления $A^{(\text{пот})}$ будем использовать борновское приближение. Полученное в результате выражение отличается от формулы (123) только отсутствием в сумме по состояниям ν слагаемого $X_\lambda/(\omega-\omega_{\lambda\alpha})$. Остается вычислить величину $A^{(\text{рез})}$.

ским сечением $4\pi\langle R\rangle^2$. Именно это имеет место в рассматриваемом случае, поскольку

$$\Delta\omega \leqslant \frac{g^2k}{4\pi}(k\langle R\rangle).$$

Используя численные значения, приведенные в § 11, мы видим, что это происходит в очень узкой области порядка $10^{-4}\,D$, которая, тем не менее, много больше ширины Γ_λ.

Заменяя в выражении (127) матричные элементы оператора H' их точными значениями (см. ур. (69) и (124)), получаем

$$A^{(\text{рез})} = L^{-3} g^2 \frac{X_\lambda}{2\omega} \mathcal{G}(E^+), \tag{129}$$

где $\mathcal{G}(E^+)$ — введенное в § 13 среднее значение функции Грина

$$\mathcal{G}(E^+) \equiv \langle \lambda | \frac{1}{E - H + i\varepsilon} | \lambda \rangle. \tag{130}$$

Подставляя выражение для этой функции, вычисленное в § 13 (см. ур. (105)), в уравнение (129), находим

$$A^{(\text{рез})} = \frac{L^{-3} g^2}{2\omega} \frac{X_\lambda}{E - E_\lambda - \Delta(E) + \frac{1}{2} i\Gamma(E)}. \tag{131}$$

Это точный ответ для $A^{(\text{рез})}$. Он отличается от борновского приближения только наличием в знаменателе устраняющей сингулярность комплексной добавки $\Delta(E) - \frac{1}{2} i\Gamma(E)$, свойства которой обсуждались в § 13. Заменяя E на E_λ (см. ур. (103), (104) и (108)), что, конечно, оправдано в приближении слабой связи, поскольку зависимость этой добавки от энергии в интересующем нас интервале несущественна, имеем

$$A^{(\text{рез})} = \frac{L^{-3} g^2}{2\omega} \frac{X_\lambda}{E - E_\lambda - \delta E_\lambda + \frac{1}{2} i\Gamma_\lambda}. \tag{132}$$

Полученное выражение характеризует амплитуду рассеяния ширины Γ_λ, сосредоточенную в окрестности точки $E_\lambda + \delta E_\lambda$.

Здесь можно повторить рассуждения главы X о рассеянии резонансов и их связи с распадающимися состояниями. Конкретизируя модель, легко получить выражения для амплитуды рассеяния, дифференциального и полного сечений и времени задержки прохождения рассеянной волны, которые практически совпадают с приведенными в § X.15 (при условии, что $A^{(\text{пот})}$ можно опустить (см. задачу 4)). Упомянутый резонанс связан с распадающимся состоянием $|\lambda\rangle$, свойства которого мы уже обсуждали в §§ 12 и 13.

Для достаточно точного измерения сечения и, в частности, для определения его характеристической зависимости от энергии необходимо, чтобы неопределенность в энергии падающего волнового пакета $\Delta\omega$ была достаточно мала, а амплитуда рассеяния оставалась практически постоянной в интервале энергий $\Delta\omega$. В области резонанса это требование можно записать так:

$$\Delta\omega \ll \Gamma_\lambda. \tag{133}$$

Тем самым, время столкновения $1/\Delta\omega$ должно быть значительно больше времени жизни $1/\Gamma_\lambda$, а последнее и не наблюдается в данном процессе.

Если же выполняется условие дополнительное к предыдущему

$$\Delta\omega \gg \Gamma_\lambda, \tag{134}$$

то можно изучить временную зависимость явления и обнаружить экспоненциальный закон распада, характерный для нестабильного состояния $|\lambda\rangle$. Все это возможно в силу специальной формы амплитуды рассеяния в резонансной области (ур. (132)) и может быть легко обосновано, если повторить вычисления § X. 16.

Полученный результат является общим, он справедлив не только для процесса рассеяния, но и для всех остальных столкновений. Любой резонанс, возникающий при столкновении и характеризуемый энергией E и шириной Γ, соответствует метастабильному состоянию с той же энергией и с временем жизни $\hbar/\Gamma$, которое можно наблюдать при условиях эксперимента дополнительных к тем, при которых обычно наблюдают резонанс [1]).

§ 16. Поглощение кванта (фотоэлектрический эффект). Радиационный захват

До сих пор мы рассматривали задачи, в которых речь шла о частице, находящейся только в связанных состояниях. В этом параграфе мы исследуем процессы поглощения кванта и радиационного захвата, в которых появляются состояния непрерывного спектра.

Будем предполагать, что $\lim V(R) = 0$ при $R \to \infty$ и, следовательно, спектр подсистемы, содержащей частицу, состоит из дискретного множества отрицательных энергий $E_\alpha, E_\beta, \ldots$ $\ldots, E_\lambda, \ldots$, которым отвечают связанные состояния, и расположенного от 0 до ∞ непрерывного спектра, которому отвечает

[1]) Здесь мы встречаемся с дополнительными проявлениями одного и того же свойства системы, поскольку они связаны с одной и той же характеристикой резольвенты $G(z)$. Последняя определяется равенством $G(z) = (z - H)^{-1}$ на комплексной плоскости z с разрезом вдоль непрерывного спектра оператора H. Единственно допустимые сингулярности резольвенты на этой плоскости могут лежать на вещественной оси, они отвечают собственным значениям дискретного спектра оператора H. Однако аналитическое продолжение резольвенты на другой лист римановой поверхности может иметь дополнительные сингулярности. Резонанс и квазистационарное состояние связаны с такой характеристикой $G(z)$, как полюс в точке $z = E - \frac{1}{2} i\Gamma$ вблизи вещественной оси на втором листе римановой поверхности в нижней полуплоскости.

континуум несвязанных ненормируемых состояний. Пусть $\psi_q^{(+)}$ и $\psi_q^{(-)}$ — стационарные волны, соответствующие согласно определению § XIX. 2 волновому вектору q. Это собственные состояния оператора $H_{\text{част}}$, отвечающие собственному значению

$$E = \frac{q^2}{2M}. \tag{135}$$

Их можно рассматривать и как собственные состояния гамильтониана H_0, задающие стационарные состояния рассеяния всей системы в случае, когда не учитывается оператор взаимодействия. Мы будем обозначать соответствующие стационарные состояния рассеяния при учете взаимодействия символами $\Psi_q^{(+)}$ и $\Psi_q^{(-)}$.

Предположим теперь, что частица, находясь в основном состоянии, облучается потоком моноэнергетических квантов, движущихся со скоростью k/ω. Если энергия падающих квантов достаточно велика для того, чтобы «ионизировать атом», т. е. если $\omega > (-E_\alpha)$, то может произойти поглощение кванта частицей и она приобретет кинетическую энергию E, равную разности полученной энергии ω и энергии связи $(-E_\alpha)$

$$E = \omega + E_\alpha.$$

В этом процессе мы узнаем фотоэлектрический эффект (§ I. 4).

Вычислим сечение поглощения кванта с импульсом k и испускания частицы в заданном направлении. Пусть вектор q задает направление, а его длина связана с энергией E соотношением (135). Таким образом, нас интересует процесс

$$i \to f \equiv (\alpha k) \to (q).$$

Так же, как и в случае упругого рассеяния, будем пользоваться формулами теории столкновений (здесь справедливы те же замечания, что и в § 14). Следовательно, сечение рассеяния определяется формулой (116) с тем же выражением для падающего потока, но $\rho_f(E) = Mq/(2\pi)^3$, а амплитуда перехода равна (см. ур. (XIX. 122))

$$T_{i\to f} \equiv \langle q\,|\,T\,|\,\alpha k\rangle = \langle \Psi_q^{(-)}\,|\,H'\,|\,\alpha k\rangle.$$

Если ограничиться низшим порядком по H', то в этом матричном элементе состояние $\Psi_q^{(-)}$ можно заменить на $\psi_q^{(-)}$ (см. ур. (XIX. 129, 130)). В результате получим

$$T_{i\to f} \approx \langle \psi_q^{(-)}\,|\,H'\,|\,\alpha k\rangle = (L^{-3}g^2/2\omega)^{1/2}\langle \psi_q^{(-)}\,|\,e^{ikR}\,|\,\alpha\rangle$$

и, следовательно,

$$\frac{d\sigma(\alpha k \to q)}{d\Omega} \approx \frac{g^2}{8\pi^2}\frac{Mq}{k}\,|\langle \psi_q^{(-)}\,|\,e^{ikR}\,|\,\alpha\rangle|^2. \tag{136}$$

Таким же образом можно вычислить сечение обратного процесса, когда частица, движущаяся с импульсом $\boldsymbol{q}$, излучает квант с импульсом $\boldsymbol{k}$ и оказывается захваченной потенциалом $V(R)$ в состояние α:

$$\boldsymbol{q} \to \alpha \boldsymbol{k}.$$

В первом порядке по H' находим

$$\frac{d\sigma\,(\boldsymbol{q} \to \alpha \boldsymbol{k})}{d\Omega} \approx \frac{g^2}{8\pi^2} \frac{Mk}{q} |\langle \alpha | e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} | \psi_{\boldsymbol{q}}^{(+)} \rangle|^2. \tag{137}$$

Это выражение можно вычислить непосредственно или получить из предыдущего, воспользовавшись соотношением микрообратимости (XIX. 190) для двух реакций $\boldsymbol{q} \to \alpha \boldsymbol{k}$ и $(K\alpha)\,(-\boldsymbol{k}) \to (-\boldsymbol{q})$, переходящих друг в друга при обращении времени. Действительно,

$$\langle \alpha | e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} | \psi_{\boldsymbol{q}}^{(+)} \rangle = \langle \psi_{-\boldsymbol{q}}^{(-)} | e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} (K | \alpha) \rangle.$$

Раздел III. КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

§ 17. Уравнения классической теории Максвелла — Лоренца

В основе классической теории излучения лежат уравнения Максвелла [1])

$$\operatorname{rot} \mathscr{E} + \partial \mathscr{H}/\partial t = 0, \tag{138а}$$

$$\operatorname{div} \mathscr{H} = 0, \tag{138б}$$

$$\operatorname{rot} \mathscr{H} - \partial \mathscr{E}/\partial t = 4\pi \boldsymbol{s}, \tag{139а}$$

$$\operatorname{div} \mathscr{E} = 4\pi s^0. \tag{139б}$$

Эти уравнения определяют электрическое и магнитное поля $\mathscr{E}$ и $\mathscr{H}$ при наличии распределенной плотности заряда s^0 и плотности тока $\boldsymbol{s}$. Последние удовлетворяют уравнению непрерывности

$$\operatorname{div} \boldsymbol{s} + \partial s^0/\partial t = 0,$$

которое следует из уравнений (139) и выражает закон сохранения заряда.

Уравнения Максвелла должны быть дополнены уравнением Лоренца, определяющим движение электрических зарядов в электромагнитном поле. Согласно этому уравнению, плотность инерциальных сил равна плотности электромагнитных сил

$$\boldsymbol{f} \equiv s^0 \mathscr{E} + (\boldsymbol{s} \times \mathscr{H}). \tag{140}$$

---

[1]) В отличие от случая скалярного поля мы не пользуемся здесь рационализованной системой единиц, как следствие этого в правых частях уравнений (139) появляются множители 4π.

Согласно классической теории электрона Лоренца материя состоит исключительно из частиц с определенной массой и зарядом. Уравнение движения частицы получится, если в уравнении Лоренца перейти к пределу, когда заряд сосредоточен в бесконечно малом объеме. Рассмотрим, например, частицу массы m и заряда e. Обозначим через $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{V}$ и $\boldsymbol{\Pi}$ координату, скорость и механический импульс частицы ($\boldsymbol{\Pi} = M\boldsymbol{V}$, где M есть релятивистская масса, определение (XX. 20)). Плотности s^0 и $\boldsymbol{s}$, точнее, вклад данной частицы в эти плотности, даются равенствами

$$s^0 = e\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}), \quad \boldsymbol{s} = e\boldsymbol{V}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}). \tag{141}$$

Действующая на частицу электромагнитная сила $\boldsymbol{F}$ равна интегралу от $\boldsymbol{f}$ по малой окрестности точки $\boldsymbol{R}$. Из уравнения Лоренца следует (см. ур. (XX. 21)):

$$d\boldsymbol{\Pi}/dt = \boldsymbol{F} \equiv e(\mathscr{E} + \boldsymbol{V} \times \mathscr{H}). \tag{142}$$

Величины $\mathscr{E}$ и $\mathscr{H}$ в этом уравнении равны значениям электрического и магнитного поля в точке $\boldsymbol{R}$. Напомним, что

$$\boldsymbol{V} \equiv d\boldsymbol{R}/dt = \boldsymbol{\Pi}/M \equiv \boldsymbol{\Pi}/\sqrt{m^2 + \Pi^2}. \tag{143}$$

Уравнения (142) и (143) описывают движение частицы в присутствии электромагнитного поля.

Все предыдущие уравнения и определения можно записать в ковариантной форме. Величины $\mathscr{E}$ и $\mathscr{H}$ образуют в соответствии с определением (XX. 9) антисимметричный тензор $F_{\mu\nu}$, а s^0 и $\boldsymbol{s}$ образуют 4-вектор $s^\mu \equiv (s^0, \boldsymbol{s})$. Уравнения Максвелла — Лоренца принимают вид [1])

$$\varepsilon^{\varkappa\lambda\mu\nu}\partial_\lambda F_{\mu\nu} = 0, \tag{138'}$$

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi s^\nu, \tag{139'}$$

а уравнение непрерывности $\partial_\nu s^\nu = 0$. Плотность силы $\boldsymbol{f}$ есть пространственная часть 4-вектора

$$f^\mu \equiv F^{\mu\nu}s_\nu. \tag{140'}$$

Аналогично $\boldsymbol{F}\,dt$ есть пространственная часть 4-вектора $eF^{\mu\nu}\,dx_\nu$, а $\boldsymbol{\Pi}$ — пространственная часть определенного в § XX. 4 4-век-

---

[1]) Вводя тензор, дуальный к электромагнитному: $\hat{F}^{\varkappa\lambda} = \frac{1}{2}\varepsilon^{\varkappa\lambda\mu\nu}F_{\mu\nu}$, уравнению (138′) можно придать более простой вид

$$\partial_\lambda \hat{F}^{\varkappa\lambda} = 0.$$

тора $\Pi^\mu = (M, \mathbf{\Pi})$. Вводя собственное время частицы и ее 4-скорость, уравнение (142) и аналогичное уравнение для M также можно записать в ковариантном виде.

§ 18. Инвариантность и законы сохранения классической теории

Релятивистская инвариантность классической теории ведет к ряду законов сохранения. В этом параграфе мы подробно рассмотрим законы сохранения энергии и импульса и кратко упомянем закон сохранения момента импульса и свойства симметрии относительно пространственного отражения и обращения времени. Будем считать для простоты, что исследуемая система состоит только из одной частицы (электрона); обобщение на случай нескольких частиц очевидно.

Для того чтобы получить законы сохранения энергии и импульса, покажем вначале, что определенный формулой (140) 4-вектор f^μ равен дивергенции некоторого тензора при условии, что $F^{\mu\nu}$ удовлетворяет уравнениям Максвелла — Лоренца.

Используя уравнение (139′), получаем

$$f^\mu \equiv F^{\mu\nu} s_\nu = \frac{1}{4\pi} F^{\mu\nu} (\partial^\rho F_{\rho\nu}) = \frac{1}{4\pi} [\partial^\rho (F^{\mu\nu} F_{\rho\nu}) - F_{\rho\nu} (\partial^\rho F^{\mu\nu})]. \quad (144)$$

Принимая во внимание антисимметрию тензора F и уравнение (138′), имеем

$$F_{\rho\nu} (\partial^\rho F^{\mu\nu}) = \frac{1}{2} F_{\rho\nu} (\partial^\rho F^{\mu\nu} + \partial^\nu F^{\rho\mu}) = \frac{1}{2} F_{\rho\nu} (\partial^\mu F^{\rho\nu}) =$$

$$= \frac{1}{4} \partial^\mu (F_{\rho\nu} F^{\rho\nu}) = \frac{1}{4} g^{\mu\rho} \partial_\rho (F_{\varkappa\lambda} F^{\varkappa\lambda}).$$

Подставляя это выражение в правую часть формулы (144) и вводя обозначение

$$T^{\mu\rho} \equiv \frac{1}{4\pi} \left(F^{\mu\nu} F^\rho_\nu - \frac{1}{4} g^{\mu\rho} F_{\varkappa\lambda} F^{\varkappa\lambda} \right), \quad (145)$$

приходим к нужному равенству

$$f^\mu = \partial_\rho T^{\mu\rho}. \quad (146)$$

Величина $T^{\mu\rho}$ называется тензором энергии — импульса. Выпишем явно его компоненты

$$T^{00} = -\frac{1}{8\pi} (\mathscr{E}^2 + \mathscr{H}^2),$$

$$T^{k0} = T^{0k} = -\frac{1}{4\pi} [\mathscr{E} \times \mathscr{H}],$$

$$T^{kl} = T^{lk} = \frac{1}{4\pi} \left(\mathscr{E}_k \mathscr{E}_l + \mathscr{H}_k \mathscr{H}_l + \frac{1}{2} \delta_{kl} (\mathscr{H}^2 - \mathscr{E}^2) \right).$$

Энергия W^0 и импульс $\boldsymbol{W}$ поля определяются как интегралы по всему пространству

$$W^0 \equiv \frac{1}{8\pi}\int (\mathscr{E}^2 + \mathscr{H}^2)\,dr, \tag{147а}$$

$$\boldsymbol{W} \equiv \frac{1}{4\pi}\int (\mathscr{E} \times \mathscr{H})\,dr, \tag{147б}$$

т. е.

$$W^\mu = -\int T^{\mu 0}\,dr. \tag{148}$$

A priori не очевидно, что W_μ есть 4-вектор. Однако, используя законы сохранения энергии и импульса, это можно доказать.

Для доказательства законов сохранения энергии и импульса запишем уравнение движения частицы в виде

$$\frac{d\Pi^\mu}{dt} = \int f^\mu\,dr.$$

Это уравнение удовлетворяется независимо от области интегрирования V, в предположении, что эта область содержит точку, в которой находится частица. Используя для f^μ выражение (146), получаем

$$\frac{d\Pi^\mu}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\int_V T^{\mu 0}\,dr\right) + \int_V \left(\sum_k \frac{\partial T^{\mu k}}{\partial x^k}\right) dr.$$

Второй интеграл можно преобразовать в интеграл по граничной поверхности объема V. Будем теперь неограниченно увеличивать объем V так, чтобы в пределе получилось все пространство. Считая, а это в данном случае вполне оправдано, что электромагнитное поле достаточно быстро убывает на бесконечности, заключаем, что интеграл по граничной поверхности стремится к нулю и, учитывая определение (148), находим

$$\frac{d}{dt}(\Pi^\mu + W^\mu) = 0.$$

Это обосновывает принятое выше определение энергии и импульса поля и представляет собой закон сохранения энергии и импульса всей системы как целого (частица + поле)

$$M + W^0 = \text{const} \quad \text{во времени}, \tag{149а}$$

$$\boldsymbol{\Pi} + \boldsymbol{W} = \text{const} \quad \text{во времени}. \tag{149б}$$

Аналогичные рассуждения приводят к следующему закону сохранения полного момента импульса:

$$(\boldsymbol{R} \times \boldsymbol{\Pi}) + \boldsymbol{I} = \text{const} \quad \text{во времени}, \tag{150}$$

если для момента импульса поля использовать определение

$$\boldsymbol{I} \equiv \frac{1}{4\pi} \int [\boldsymbol{r} \times (\mathscr{E} \times \mathscr{H})]\, d\boldsymbol{r}. \tag{151}$$

Если система состоит из нескольких частиц, то $\boldsymbol{\Pi}$ и M нужно заменить на суммы импульсов и релятивистских масс, а $(\boldsymbol{R} \times \boldsymbol{\Pi})$ — на сумму моментов импульса. После такой замены три закона сохранения — (149а), (149б) и (150) остаются выполненными.

Рассмотрим отражения пространства и времени.

Уравнения движения инвариантны относительно пространственного отражения ($t \to t$, $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$), если заряд e является истинным скаляром, а напряженность поля $F^{\mu\nu}$ — истинным тензором. В этом случае s^0 преобразуется как скалярная функция, заданная в трехмерном пространстве, $\boldsymbol{s}$ и $\mathscr{E}$ — как полярно-векторные поля, а $\mathscr{H}$ — как аксиально-векторное поле; в частности, имеем

$$\mathscr{E}(t, \boldsymbol{r}) \to -\mathscr{E}(t, -\boldsymbol{r}), \quad \mathscr{H}(t, \boldsymbol{r}) \to +\mathscr{H}(t, -\boldsymbol{r}). \tag{152}$$

Уравнения движения инвариантны при обращении времени ($t \to -t, \boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}$), если заряд e считать скаляром, а $F^{\mu\nu}$ — «псевдотензором». В этом случае величины s^0 и $\mathscr{E}$ не меняются, а $\boldsymbol{s}$ и $\mathscr{H}$ меняют знак

$$\mathscr{E}(t, \boldsymbol{r}) \to +\mathscr{E}(-t, \boldsymbol{r}), \quad \mathscr{H}(t, \boldsymbol{r}) \to -\mathscr{H}(-t, \boldsymbol{r}). \tag{153}$$

§ 19. Собственная энергия и классический радиус электрона

На данной стадии нам следует напомнить о серьезной трудности классической теории излучения. Во всех предыдущих рассуждениях предполагалось, что заряд каждой частицы сосредоточен в очень малом объеме, например, в сфере, радиус a которой стремится к нулю. В действительности, гипотеза о чисто точечном заряде не является самосогласованной. Рассмотрим изолированный электрон, расположенный в начале координат, и вычислим энергию δm создаваемого электроном поля. Эту энергию обычно называют *электростатической собственной энергией*. В соответствии с рассуждениями § 11, которые можно повторить здесь без изменений, величина δm является *перенормировкой массы*, и экспериментально наблюдаемая масса равна

$$m_{\text{эксп}} = m + \delta m.$$

Поскольку электрическое поле в области $(r > a)$ равно $e\boldsymbol{r}/r^3$, то из формулы (147а) получаем

$$\delta m > \frac{e^2}{8\pi} \int \frac{d\boldsymbol{r}}{r^4} = \frac{e^2}{2a}$$

и так как $\delta m < m_{\text{эксп}}$, то $a > e^2/2m_{\text{эксп}}$. Величина

$$r_0 = \frac{e^2}{m_{\text{эксп}}} \left(\approx 2{,}82 \cdot 10^{-13}\ \text{см}\right)$$

называется *классическим радиусом электрона*. Таким образом, классический электрон имеет конечные размеры порядка r_0. Однако теория не в состоянии объяснить его устойчивость и *a fortiori* детали его внутренней структуры, т. е. распределение зарядов и токов в области $r < r_0$. Это связано с тем, что электромагнитные силы между отдельными составляющими электрона являются в основном силами отталкивания, которые стремятся развалить электрон. Для устойчивости их необходимо скомпенсировать связующими силами неэлектромагнитного происхождения. Введение таких сил в релятивистской теории сталкивается с серьезными трудностями. В действительности довольствуются какими-либо гипотезами *ad hoc* о внутренней структуре электрона. Следовательно, естественно ожидать, что мы будем в состоянии правильно описывать только явления, зависимость которых от деталей внутренней структуры несущественна, т. е. явления, характерная длина которых достаточно велика ($\lambda \gg r_0$) [1]).

§ 20. Электромагнитный потенциал. Выбор калибровки

Можно получить уравнения, которые эквивалентны, но проще уравнений (138), если ввести векторный $\boldsymbol{A}$ и скалярный φ потенциалы следующим образом (см. ур. (XX. 17)):

$$\mathcal{H} = \operatorname{rot} \boldsymbol{A}, \quad \mathcal{E} = -\partial \boldsymbol{A}/\partial t - \operatorname{grad} \varphi. \tag{154}$$

Уравнения (138) тогда выполняются автоматически, а уравнения (139) эквивалентны следующим:

$$\ddot{\boldsymbol{A}} - \Delta \boldsymbol{A} + \operatorname{grad} (\dot{\varphi} + \operatorname{div} \boldsymbol{A}) = 4\pi \boldsymbol{s}, \tag{155а}$$

$$\ddot{\varphi} - \Delta \varphi - \frac{\partial}{\partial t} (\dot{\varphi} + \operatorname{div} A) = 4\pi s^0. \tag{155б}$$

Уравнения (154) определяют $\boldsymbol{A}$ и φ только с точностью до произвольной функции $G(t, \boldsymbol{r})$. Эти уравнения не изменятся, если сделать подстановку

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} - \operatorname{grad} G, \quad \varphi \to \varphi + \partial G/\partial t. \tag{156}$$

Такая замена называется *калибровочным преобразованием* (см. § XX. 20).

Приведенные соотношения можно записать в ковариантном виде. Потенциалы $\boldsymbol{A}$ и φ образуют 4-вектор (см. ур (XX. 6)); в соответствии с уравнениями (154) ротор вектора A^μ равен $F^{\mu\nu}$

[1]) В квантовой теории существует «ультрафиолетовая катастрофа» того же происхождения. Тем не менее не следует проводить аналогию между классической и квантовой теориями слишком далеко. Такие эффекты как рождение пар заставляют считать радиус «квантового электрона» порядка $\hbar/mc$, т. е. в 137 раз больше r_0.

(см. ур. (XX. 8)), последняя величина определяет A^μ с точностью до градиента произвольной функции. Калибровочное преобразование (156) и состоит в добавлении к потенциалу такого градиента

$$A^\mu \to A^\mu + \partial^\mu G \qquad (G \text{ — произвольна}). \tag{157}$$

Уравнения (155) принимают вид

$$\Box A^\mu - \partial^\mu (\partial_\nu A^\nu) = 4\pi s^\mu. \tag{158}$$

Не нарушая явной ковариантности теории, можно частично устранить произвол в калибровке, потребовав, чтобы выполнялось *дополнительное условие Лоренца*

$$\partial_\nu A^\nu = 0. \tag{159}$$

В этом случае уравнение движения для потенциала примет более простой вид

$$\Box A^\mu = 4\pi s^\mu. \tag{160}$$

Условие Лоренца фиксирует калибровку потенциала с точностью до функции χ — произвольного решения уравнения $\Box\chi=0$. Другими словами, уравнения (159), (160) и определение поля $F^{\mu\nu}$ инвариантны относительно *лоренцевых калибровочных преобразований*, которые называют иногда *специальными*:

$$A^\mu \to A^\mu + \partial^\mu \chi, \qquad (\Box \chi = 0). \tag{161}$$

Простые уравнения движения можно также получить, если потребовать выполнения условия

$$\operatorname{div} \boldsymbol{A} = 0. \tag{162}$$

В отличие от условия Лоренца оно нарушает явную ковариантность теории. Тем не менее, его преимущество состоит в том, что полностью устраняется произвол в калибровке. Введенная калибровка обычно называется *радиационной калибровкой*. Ее мы и будем использовать в дальнейшем. Прежде чем начать изложение теории излучения в этой калибровке, полезно напомнить важное свойство разложения векторных полей.

§ 21. Продольная и поперечная часть векторного поля

Любое вещественное или комплексное векторное поле $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ можно рассматривать как суперпозицию двух полей

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{B}_\parallel(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{B}_\perp(\boldsymbol{r}), \tag{163}$$

одно из которых $\boldsymbol{B}_\parallel$ — безвихревое, а другое $\boldsymbol{B}_\perp$ — поле с нулевой дивергенцией. Получаем

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{B}_\parallel = 0, \quad \operatorname{div} \boldsymbol{B}_\parallel = \operatorname{div} \boldsymbol{B}, \tag{164}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{B}_\perp = 0, \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{B}_\perp = \operatorname{rot} \boldsymbol{B}. \tag{165}$$

Если ограничиться рассмотрением квадратично-интегрируемых векторных полей, то такое разложение единственно [1]). По определению поля $\boldsymbol{B}_\parallel$ и $\boldsymbol{B}_\perp$ представляют соответственно *продольную часть и поперечную часть* поля $\boldsymbol{B}$. Справедливы соотношения

$$\boldsymbol{B}_\parallel = \operatorname{grad} U, \quad U(r) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{\operatorname{div}\boldsymbol{B}(r')}{|r-r'|}\,dr', \tag{166}$$

$$\boldsymbol{B}_\perp = \operatorname{rot}\boldsymbol{V}, \qquad \boldsymbol{V}(r) = \frac{1}{4\pi}\int \frac{\operatorname{rot}\boldsymbol{B}(r')}{|r-r'|}\,dr'. \tag{167}$$

Такое разложение легко произвести, используя преобразование Фурье. Обозначим преобразования Фурье полей $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{B}_\perp$ и $\boldsymbol{B}_\parallel$ соответственно $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{b}_\perp$ и $\boldsymbol{b}_\parallel$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}(\boldsymbol{k}) &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\,e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\,d\boldsymbol{r}, \\ \boldsymbol{b}_\parallel(\boldsymbol{k}) &= \quad \ldots \qquad \text{etc.} \end{aligned} \tag{168}$$

Уравнения (164) и (165) эквивалентны следующим уравнениям:

$$\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}_\parallel = 0, \qquad (\boldsymbol{k}\boldsymbol{b}_\parallel) = (\boldsymbol{k}\boldsymbol{b}),$$
$$(\boldsymbol{k}\boldsymbol{b}_\perp) = 0, \quad \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}_\perp = \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}.$$

Проекция b вдоль вектора k равна $B_\parallel$, отсюда название для $B_\parallel$ — продольная часть [2]). Проекция b, перпендикулярная вектору k, равна $b_\perp$, отсюда название для $B_\perp$ — поперечная часть. Уравнения (166) и (167) эквивалентны соответственно уравнениям

$$\boldsymbol{b}_\parallel = \boldsymbol{k}(\boldsymbol{b}\boldsymbol{k})/k^2, \quad \boldsymbol{b}_\perp = \boldsymbol{k}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{k})/k^2. \tag{169}$$

Преобразование Фурье функции U (определение (166)) равно

$$u(\boldsymbol{k}) = -i(\boldsymbol{b}\boldsymbol{k})/k^2.$$

[*N. B.* Преобразование Фурье $1/r$ равно $\sqrt{2\pi}/\pi k^2$].

Говоря более общим образом, пространство квадратично-интегрируемых векторных полей — пространство волновых функций частицы спина 1 — представимо в виде прямой суммы двух ортогональных подпространств: пространства продольных полей и пространства поперечных полей. Рассмотренное нами разложение сводится к тому, что поле $\boldsymbol{B}$ можно записать в виде суммы его проекций на эти дополнительные друг к другу подпространства.

---

[1]) Следует также считать квадратично интегрируемыми поля $\boldsymbol{B}_\parallel$ и $\boldsymbol{B}_\perp$.

[2]) Не следует путать $\boldsymbol{B}_\parallel$ с *радиальной* составляющей вектора $\boldsymbol{B}$ — проекцией $\boldsymbol{B}$ вдоль вектора r: $\boldsymbol{B}_{\text{rad}} = \boldsymbol{r}(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{r})/r^2$. Отметим, что радиальная составляющая чисто поперечного поля в общем случае отлична от нуля.

Проекции можно получить автоматически, выбирая подходящий базис. Пусть

$$\boldsymbol{L}^{(1)},\ \boldsymbol{L}^{(2)},\ \ldots,\ \boldsymbol{L}^{(\lambda)}$$

полный ортонормированный набор продольных полей, а

$$\boldsymbol{T}^{(1)},\ \boldsymbol{T}^{(2)},\ \ldots,\ \boldsymbol{T}^{(\tau)}$$

полный ортонормированный набор поперечных полей:

$$\operatorname{rot}\boldsymbol{L}^{(\lambda)}=0,\quad \int(\boldsymbol{L}^{(\lambda)*}\boldsymbol{L}^{(\lambda')})\,d\boldsymbol{r}=\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{170а}$$

$$\operatorname{div}\boldsymbol{T}^{(\tau)}=0,\quad \int(\boldsymbol{T}^{(\tau)*}\boldsymbol{T}^{(\tau')})\,d\boldsymbol{r}=\delta_{\tau\tau'}, \tag{170б}$$

$$\sum_{\lambda}L_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{r})\,L_j^{(\lambda)*}(\boldsymbol{r}')+\sum_{\tau}T_i^{(\tau)}(\boldsymbol{r})\,T_j^{(\tau)*}(\boldsymbol{r}')=\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{170в}$$

$$(i,\ j=x,\ y,\ z)$$

Введем обозначения

$$\beta_{\parallel}^{(\lambda)}=\int(\boldsymbol{L}^{(\lambda)*}\boldsymbol{B})\,d\boldsymbol{r},\quad \beta_{\perp}^{(\tau)}=\int(\boldsymbol{T}^{(\tau)*}\boldsymbol{B})\,d\boldsymbol{r}. \tag{171}$$

Тогда имеем

$$\boldsymbol{B}_{\parallel}=\sum_{\lambda}\beta_{\parallel}^{(\lambda)}\boldsymbol{L}^{(\lambda)},\quad \boldsymbol{B}_{\perp}=\sum_{\tau}\beta_{\perp}^{(\tau)}\boldsymbol{T}^{(\tau)}. \tag{172}$$

Использование преобразования Фурье позволяет выбрать подходящий базис, состоящий из продольных и поперечных плоских волн. Каждому волновому вектору отвечает продольное поле

$$\boldsymbol{L}^{(\boldsymbol{k})}=(2\pi)^{-3/2}\hat{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\quad(\hat{\boldsymbol{k}}\equiv\boldsymbol{k}/k) \tag{173а}$$

и два ортогональных друг другу поперечных поля

$$\boldsymbol{T}^{(\boldsymbol{k}\omega)}=(2\pi)^{-3/2}\boldsymbol{\varepsilon}^{(\omega)}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\qquad(\omega=1,\ 2), \tag{173б}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}$ — два произвольных единичных вектора [1]), ортогональных вектору $\boldsymbol{k}$ и друг другу:

$$(\boldsymbol{k}\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)})=(\boldsymbol{k}\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)})=0, \tag{174а}$$

$$(\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)*}\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)})=(\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)*}\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)})=1,\quad(\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)*}\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)})=0. \tag{174б}$$

---

[1]) Эти векторы не обязательно вещественные. По определению вектор называется вещественным, если вещественны его декартовы компоненты. Так, вектор $\boldsymbol{k}$ — вещественный вектор. Скалярное произведение двух комплексных векторов $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ определяется формулой

$$(\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{B})\equiv A_x^*B_x+A_y^*B_y+A_z^*B_z.$$

Компоненты вектора $\boldsymbol{B}$ в этом базисе (определение (171)) связаны с векторами $\boldsymbol{b}_\parallel$ и $\boldsymbol{b}_\perp$ равенствами

$$\boldsymbol{b}_\parallel = \beta_\parallel^{(\boldsymbol{k})}\hat{\boldsymbol{k}}, \quad \boldsymbol{b}_\perp = \sum_\omega \beta_\perp^{(\boldsymbol{k}\omega)}\boldsymbol{e}^{(\omega)}. \tag{175}$$

Плоские волны здесь зависят от непрерывного индекса $\boldsymbol{k}$ и нормированы на $\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$. Для того чтобы иметь дело только с дискретными индексами, применяют обычный прием. Систему помещают в куб со стороной L, тогда множитель $(2\pi)^{-3/2}$ в определении (173а, б) нужно заменить на $L^{-3/2}$.

Часто в качестве базиса выбираются также сферические волны. К этому вопросу мы еще вернемся в § 29.

§ 22. Исключение продольного поля

Среди уравнений Максвелла уравнения (138б) и (139б), строго говоря, не являются уравнениями движения, они представляют собой накладываемые на поля $\mathscr{E}$ и $\mathscr{H}$ связи, которые фиксируют продольные составляющие этих полей.

Из уравнения (138б) следует, что $\mathscr{H}_\parallel = 0$, а из уравнения (139б) следует, что $\mathscr{E}_\parallel(t, \boldsymbol{r})$ есть *электростатическое поле, созданное распределением заряда* $s_0(t, \boldsymbol{r})$. Следовательно, для определения динамического состояния системы достаточно задать распределения зарядов и токов (т. е. координаты и скорости частиц) и поперечные поля $\mathscr{H}$ и $\mathscr{E}$. Таким образом, можно сформулировать теорию, полностью устранив продольную часть электромагнитного поля.

Вместо того, чтобы проводить такое исключение непосредственно, удобно ввести потенциал $(\varphi, \boldsymbol{A})$ в радиационной калибровке (см. ур. (162)). Речь идет о простой замене переменных. По определению поле $\boldsymbol{A}$ — чисто поперечное

$$\boldsymbol{A}_\parallel = 0, \quad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_\perp. \tag{176}$$

Старые переменные выражаются через новые по формулам (154) или

$$\mathscr{E}_\parallel = -\operatorname{grad}\varphi, \tag{177}$$

$$\mathscr{H} = \operatorname{rot}\boldsymbol{A}, \quad \mathscr{E}_\perp = -\partial\boldsymbol{A}/\partial t. \tag{178}$$

Потенциал можно найти из уравнения (156), которое в данном случае принимает вид

$$\Delta\varphi = -4\pi s^0. \tag{179}$$

Получаем

$$\varphi(t, \boldsymbol{r}) = \int \frac{s^0(t, \boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,d\boldsymbol{r}', \tag{180}$$

откуда следует упоминавшееся выше выражение для $\mathscr{E}_\parallel$ в терминах s^0. Для исключения потенциала φ из уравнения (155а) достаточно переписать это уравнение отдельно для продольной и поперечной составляющих. Первое из этих уравнений,

$$\operatorname{grad}\dot{\varphi} = 4\pi s_\parallel, \tag{181}$$

выполняется тождественно, если потенциал определяется формулой (180)[1]).

Второе уравнение не зависит от φ и является уравнением движения

$$\ddot{\boldsymbol{A}} - \Delta \boldsymbol{A} = 4\pi \boldsymbol{s}_\perp. \tag{182}$$

Остается исключить продольное поле из уравнений движения частиц (ур. (142), (143)), т. е. из выражения для силы Лоренца, которая действует на каждую из частиц. Различные величины, связанные с частицами, будут обозначаться теми же символами, что и в § 17, и нумероваться индексами 1, 2, ..., n, ... Так, вклад в плотность заряда частицы с номером n равен $s_n^0 = e_n \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n)$, и уравнение (179) принимает вид

$$\Delta\varphi = -4\pi \sum_n e_n \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n). \tag{183}$$

Решением этого уравнения является кулоновский потенциал

$$\varphi = \sum_n e_n / |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n|. \tag{184}$$

Пусть $\boldsymbol{F}_i$ — сила Лоренца, действующая на частицу с номером i. Ее можно представить следующим образом

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{F}_i = \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{tr}} + \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{long}}, \\ &\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{tr}} = e_i\left(\mathscr{E}_\perp(i) + \boldsymbol{V}_i \times \mathscr{H}(i)\right) = e_i\left(-\frac{\partial \boldsymbol{A}(i)}{\partial t} + \boldsymbol{V} \times \operatorname{rot} \boldsymbol{A}(i)\right), \\ &\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{long}} = e_i \mathscr{E}_\parallel(i) = e_i \operatorname{grad}\varphi(i), \end{aligned} \tag{185}$$

где $\mathscr{E}_\perp(i)$, $\mathscr{H}(i)$, ... — значения полей $\mathscr{E}_\perp$, $\mathscr{H}$, ... в точке $\boldsymbol{R}_i$. Подставляя выражение (184) в формулу для $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{long}}$, мы окончательно исключаем продольное поле.

Однако такую подстановку нельзя произвести непосредственно, поскольку потенциал φ расходится в точке $\boldsymbol{R}_i$. Трудность возникла оттого, что мы считаем заряды точечными. Ве-

[1]) Для справедливости этого равенства достаточно, чтобы были равны дивергенции каждой из его частей: $\Delta\dot{\varphi} = 4\pi \operatorname{div} \boldsymbol{s}$. Это уравнение следует из уравнения (179), если последнее продифференцировать по t и воспользоваться уравнением непрерывности.

личина $\boldsymbol{F}_i^{\text{long}}$ есть действующая на частицу i электростатическая сила, порожденная всеми имеющимися зарядами. Обозначим $\boldsymbol{F}_i'$ вклад в $\boldsymbol{F}_i^{\text{long}}$ со стороны заряда частицы i, а $\boldsymbol{F}_i^{\text{coul}}$ — вклад со стороны всех остальных зарядов. Если частицы находятся достаточно далеко друг от друга, то, вычисляя $\boldsymbol{F}_i^{\text{coul}}$, можно считать заряды точечными, и мы получим

$$\boldsymbol{F}_i^{\text{coul}} = \sum_{n \neq i} e_i e_n (\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_n)/|\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_n|^3. \tag{186}$$

При вычислении $\boldsymbol{F}_i'$ гипотеза точечности заряда, очевидно, неприменима. В действительности, при любом распределении заряда внутри частицы i получим

$$\boldsymbol{F}_i' = 0.$$

Таким образом, на каждую частицу действуют сила Лоренца, порожденная поперечным полем, и электростатическая сила со стороны всех других *частиц* (ур. (186))

$$\boldsymbol{F}_i = \boldsymbol{F}_i^{\text{tr}} + \boldsymbol{F}_i^{\text{coul}}. \tag{187}$$

§ 23. Энергия, импульс, момент импульса

Исключив продольное поле из уравнений движения, естественно исключить его и из законов сохранения энергии, импульса и момента импульса.

Заменяя в выражении для энергии поля (ур. (147а)) $\mathscr{E}$ на $\mathscr{E}_\perp$, мы получаем новое выражение, зависящее только от поперечных составляющих. Будем называть эту величину *энергией излучения* U

$$U \equiv \frac{1}{8\pi} \int (\mathscr{E}_\perp^2 + \mathscr{H}^2)\, d\boldsymbol{r}. \tag{188}$$

Аналогичным образом определим *импульс излучения* $\boldsymbol{X}$ (см. ур. (147б)) и *момент импульса излучения* $\boldsymbol{G}$ (см. ур. (151))

$$\boldsymbol{X} \equiv \frac{1}{4\pi} \int (\mathscr{E}_\perp \times \mathscr{H})\, d\boldsymbol{r}, \tag{189}$$

$$\boldsymbol{G} \equiv \frac{1}{4\pi} \int [\boldsymbol{r} \times (\mathscr{E} \times \mathscr{H})]\, d\boldsymbol{r}. \tag{190}$$

Величины U, $\boldsymbol{X}$ и $\boldsymbol{G}$ равны соответственно энергии, импульсу и моменту импульса системы, когда отсутствуют заряды.

Эти величины можно представить в форме, аналогичной приведенной в разделе I для энергии, испульса и момента импульса скалярного поля (см. § 4, 6 и 7). Заменяя в выражениях (188)—(190) $\mathscr{H}$ на $\operatorname{rot} \boldsymbol{A}$, интегрируя несколько раз по частям

и используя тот факт, что $\mathscr{E}_\perp$ и $\boldsymbol{A}$ — поперечные поля, исчезающие на бесконечности, получаем

$$U = \frac{1}{8\pi}\int \sum_i (\mathscr{E}_{\perp i}^2 + (\nabla A_i)^2)\, d\boldsymbol{r}, \tag{188'}$$

$$\boldsymbol{X} = \frac{1}{4\pi}\int \sum_i \mathscr{E}_{\perp i}(\nabla A_i)\, d\boldsymbol{r}, \tag{189'}$$

и

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{G}^{(0)} + \boldsymbol{G}^{(s)}, \tag{190'}$$

где

$$\boldsymbol{G}^{(0)} \equiv \frac{1}{4\pi}\int \sum_i \mathscr{E}_{\perp i}(\boldsymbol{l}A_i)\, d\boldsymbol{r}, \tag{191а}$$

$$\boldsymbol{G}^{(s)} \equiv \frac{1}{4\pi}\int (\mathscr{E}_\perp \times \boldsymbol{A})\, d\boldsymbol{r}. \tag{191б}$$

При получении этих выражений удобно использовать методы и обозначения тензорного исчисления, в частности, полностью антисимметричный тензор трехмерного эвклидова пространства ε_{ijk} (определение дано в сноске на стр. 16) и тождество

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{il}.$$

Тогда

$$\mathscr{H}^2 = (\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})^2 = \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}\frac{\partial A_j}{\partial x_i}\frac{\partial A_m}{\partial x_l} = \frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l} - \frac{\partial A_l}{\partial x_m}\frac{\partial A_m}{\partial x_l} =$$

$$= \frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l} - \frac{\partial}{\partial x_l}\left(A_m\frac{\partial A_l}{\partial x_m}\right) + A_m\frac{\partial^2 A_l}{\partial x_m \partial x_l},$$

и поскольку $\boldsymbol{A}$ — поперечное поле, исчезающее на бесконечности, имеем

$$\int \mathscr{H}^2\, dr = \int \frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\, dr \equiv \int \sum_m (\nabla A_m)^2\, dr,$$

откуда следует уравнение (188'). Пользуясь аналогичным приемом, находим

$$(\mathscr{E}_\perp \times \mathscr{H})_l = \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}\mathscr{E}_{\perp j}\frac{\partial A_m}{\partial x_l} = \mathscr{E}_{\perp m}\frac{\partial A_m}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_l}(\mathscr{E}_{\perp l}A_i),$$

откуда следует уравнение (189'). Подобным образом,

$$(\boldsymbol{r} \times (\mathscr{E}_\perp \times \mathscr{H}))_i = \mathscr{E}_{\perp m}\left(\varepsilon_{ijk}x_j\frac{\partial A_m}{\partial x_k}\right) - \frac{\partial}{\partial x_l}(\varepsilon_{ijk}x_j\mathscr{E}_{\perp l}A_k) + \varepsilon_{ijk}\mathscr{E}_{\perp j}A_k,$$

откуда следует уравнение (190') при условии, что $\boldsymbol{G}^{(0)}$ и $\boldsymbol{G}^{(s)}$ определяются формулами (191а, б).

Поучительно сравнить полученные выражения с соответствующими формулами для скалярного поля. Рассмотрим, например, формулы (130) и (188') для энергии. Различия возникают в силу того, что: (i) поле $\boldsymbol{A}$ — векторное; (ii) его масса равна нулю; (iii) использованные здесь единицы отличаются от

принятых в разделе I множителем $\sqrt{4\pi}$. В остальном выражение (188′) является простым обобщением выражения (30), если считать $-\mathscr{E}_\perp$, как это подсказывает нам второе из уравнений (178) и что будет подтверждено в дальнейшем, канонически сопряженным к полю $\boldsymbol{A}$ импульсом. То же можно сказать о формулах (55) и (189′) для импульса и для момента импульса (ур. (61) и (190′)). Векторный характер поля отчетливо проявляется в выражении для момента импульса, где кроме члена $\boldsymbol{G}^{(0)}$, который является простым обобщением выражения для момента импульса скалярного поля, появляется дополнительное слагаемое $\boldsymbol{G}^{(s)}$. Величина $\boldsymbol{G}^{(0)}$ представляет собой «орбитальный момент импульса», а $\boldsymbol{G}^{(s)}$ — «спин» поля [1]).

Теперь мы можем исключить продольное поле из полученных в § 18 выражений для полной энергии, полного импульса и полного момента импульса системы, состоящей из электромагнитного поля и взаимодействующих с ним заряженных частиц.

Рассмотрим вначале полный импульс системы.

В соответствии с определением § 18 имеем

$$\boldsymbol{P}_{\text{tot}} = \sum_n \boldsymbol{\Pi}_n + \boldsymbol{W} = \sum_n \boldsymbol{\Pi}_n + \boldsymbol{X} + \boldsymbol{X}', \tag{192}$$

где

$$\boldsymbol{X}' \equiv \frac{1}{4\pi} \int (\mathscr{E}_\parallel \times \mathscr{H})\, d\boldsymbol{r}.$$

Заменяя $\mathscr{E}_\parallel$ и $\mathscr{H}$ по формулам (177), (178), получаем

$$\mathscr{E}_\parallel \times \mathscr{H} = -(\operatorname{grad}\varphi \times \mathscr{H}) = \varphi \operatorname{rot}\mathscr{H} - \operatorname{rot}(\varphi\mathscr{H}) =$$
$$= -\varphi(\Delta\boldsymbol{A}) - \operatorname{rot}(\varphi\mathscr{H}).$$

Интегрируя по частям и учитывая, что φ и $\boldsymbol{A}$ исчезают на бесконечности, получаем

$$\boldsymbol{X}' = -\frac{1}{4\pi}\int \varphi(\Delta\boldsymbol{A})\, d\boldsymbol{r} = -\frac{1}{4\pi}\int \boldsymbol{A}(\Delta\varphi)\, d\boldsymbol{r}.$$

В силу уравнения (183) $\Delta\varphi$ равно сумме δ-функций, интегрирование легко выполняется, в результате имеем

$$\boldsymbol{X}' = \sum_n e_n \boldsymbol{A}(n),$$

---

[1]) В данном случае ситуация усложняется из-за условия поперечности. Среди других следствий из него вытекает, что амплитуды поля $\boldsymbol{A}$ в каждой точке пространства не являются независимыми динамическими переменными. По этой же причине в задаче 5 получается специфическая форма коммутационных соотношений, а векторные операторы $\boldsymbol{G}^{(0)}$ и $\boldsymbol{G}^{(s)}$ по отдельности не удовлетворяют коммутационным соотношениям, характеризующим момент импульса.

где, как и ранее, $\boldsymbol{A}(n) \equiv \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}_n)$. Подставляя найденное выражение в формулу (192), приходим к *определению импульса* $\boldsymbol{P}_n$ *частицы с номером* n [1])

$$\boldsymbol{P}_n \equiv \boldsymbol{\Pi}_n + e_n \boldsymbol{A}(n). \tag{193}$$

Выражение для полного импульса принимает вид суммы импульсов частиц и импульса излучения

$$\boldsymbol{P}_{\text{tot}} = \sum_n \boldsymbol{P}_n + \boldsymbol{X}. \tag{194}$$

Эта сумма является интегралом движения.

Поступая аналогичным образом с моментом импульса, приходим к определению момента импульса $\boldsymbol{L}_n$ частицы n

$$\boldsymbol{L}_n \equiv \boldsymbol{R}_n \times \boldsymbol{P}_n, \tag{195}$$

где $\boldsymbol{P}_n$ — определенный выше импульс. Вычисления приводят к следующему выражению для полного момента импульса системы:

$$\boldsymbol{J}_{\text{tot}} = \sum_n \boldsymbol{L}_n + \boldsymbol{G}. \tag{196}$$

Наконец, рассмотрим полную энергию системы. Согласно определению § 17 ее можно представить в виде

$$\sum_n M_n + U + U',$$

где

$$U' \equiv W^0 - U \equiv \frac{1}{8\pi} \int \mathscr{E}_{\parallel}^2 \, d\boldsymbol{r}.$$

Используя формулу (177) и интегрируя по частям, получаем

$$U' = \frac{1}{8\pi} \int (\operatorname{grad} \varphi)^2 \, d\boldsymbol{r} = -\frac{1}{8\pi} \int \varphi (\Delta \varphi) \, d\boldsymbol{r},$$

где φ — порожденный зарядом электростатический потенциал. Если считать заряды точечными, как это мы делали до настоящего момента, то находим

$$U' = \frac{1}{2} \sum_n \sum_p \frac{e_n e_p}{|\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_p|}.$$

---

[1]) Напомним, что мы используем радиационную калибровку, в которой поле A чисто поперечно. Мы получим определение, *независящее от калибровки*, если положим

$$\boldsymbol{P}_n \equiv \boldsymbol{\Pi}_n + e_n \boldsymbol{A}_{\perp}(n).$$

В полученной двойной сумме «перекрестные члены» ($n \neq p$) отвечают кулоновской энергии взаимодействующих зарядов

$$H_{\text{coul}} \equiv \sum_{n<p} \frac{e_n e_p}{|\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_p|}. \tag{197}$$

(символ $\sum_{n<p}$ означает суммирование по всем парам частиц.)

Все члены с совпадающими индексами обращаются в бесконечность. Эта трудность имеет то же происхождение, что и встретившаяся в конце § 22 при вычислении F_i^{long}. Слагаемое с двумя индексами i представляет собой электростатическую энергию частицы i в собственном электрическом поле. Эта энергия существенно зависит от распределения заряда внутри частицы и становится бесконечной в пределе, когда размеры частицы стремятся к нулю (см. § 19). Чтобы получить разумную величину собственной энергии, следовало бы добавить в нее вклад упоминавшихся в § 19 сил сцепления, что не было сделано в данных вычислениях. Не имея последовательной теории внутренней структуры частиц, мы будем считать, что при подходящей модификации массы покоя m_i эти члены «собственной энергии» можно опустить. Тогда для полной энергии системы получим следующее выражение:

$$E_{\text{tot}} = \sum_n M_n + H_{\text{coul}} + U. \tag{198}$$

Перед нами сумма энергий масс частиц, кулоновской энергии частиц и энергии излучения.

§ 24. Гамильтониан свободного электромагнитного поля

Полученные в § 22 уравнения движения можно представить в каноническом виде. Рассмотрим вначале случай свободного излучения, т. е. электромагнитное поле без зарядов.

Динамическое состояние поля в каждый момент времени определяется заданием поперечного векторного потенциала $\boldsymbol{A}$ и его скорости $\partial \boldsymbol{A}/\partial t$. Электрическое и магнитное поля связаны с этими векторными полями формулами (178). Зависимость от времени определяется уравнением (182), которое в случае отсутствия зарядов принимает вид

$$\Box \boldsymbol{A} \equiv \ddot{\boldsymbol{A}} - \Delta \boldsymbol{A} = 0 \qquad (\operatorname{div} \boldsymbol{A} = 0). \tag{199}$$

Получили то же уравнение, что и для свободного скалярного поля (см. ур. (1)). Единственное отличие состоит в том, что в данном случае мы имеем поперечное векторное поле и отсутствует член с массой. В остальном канонический формализм

можно строить тем же способом, что и в разделе I для случая скалярного поля. Пусть $\boldsymbol{T}^{(1)}$, $\boldsymbol{T}^{(2)}$, ..., $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$, ... — полный набор ортонормированных поперечных полей (см. ур. (170б)), аналогичный определенному в § 21. Предположим далее, что этот набор является базисом *вещественных нормальных координат*

$$\boldsymbol{T}^{(\tau)*} = \boldsymbol{T}^{(\tau)},$$

$$(\Delta + k_\tau^2)\,\boldsymbol{T}^{(\tau)} = 0. \tag{200}$$

Соответствующие нормальные координаты q_τ определяются соотношением (см. ур. (6))

$$q_\tau = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)}\boldsymbol{A})\, d\boldsymbol{r}. \tag{201}$$

Величины q_τ — вещественные функции времени, удовлетворяющие уравнению для гармонического осциллятора с частотой k_τ

$$\ddot{q}_\tau + k_\tau q_\tau = 0. \tag{202}$$

Такое движение порождается гамильтонианом h_τ

$$h_\tau = \frac{1}{2}\,(p_\tau^2 + k_\tau^2 q_\tau^2), \tag{203}$$

где p_τ — импульс, канонически сопряженный q_τ. Импульс p_τ равен $\dot{q}_\tau$ и получается из «скорости» поля A по формуле

$$p_\tau = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)}\dot{\boldsymbol{A}})\, d\boldsymbol{r}. \tag{204}$$

Складывая гамильтонианы, отвечающие различным собственным частотам, получаем полный гамильтониан свободного излучения

$$H_{\text{изл}} = \sum_\tau h_\tau. \tag{205}$$

Множитель $1/\sqrt{4\pi}$ в определениях (201) и (204) возник как следствие выбора единиц измерения электромагнитного поля [1]).

Гамильтониан $H_{\text{изл}}$ представляет собой энергию излучения, выраженную в канонических переменных. Действительно, имеем (см. ур. (178))

$$\boldsymbol{A} = \sqrt{4\pi} \sum_\tau q_\tau \boldsymbol{T}^{(\tau)}, \tag{206}$$

$$\mathscr{E}_\perp = -\sqrt{4\pi} \sum_\tau p_\tau \boldsymbol{T}^{(\tau)}. \tag{207}$$

---

[1]) См. первую сноску к § 17.

Из вещественности и ортонормированности множества $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ следует

$$\int \mathscr{E}_\perp^2\, d\boldsymbol{r} = 4\pi \sum_\tau p_\tau^2. \tag{208}$$

Кроме этого, поскольку $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ — поперечные векторные поля, удовлетворяющие уравнению (200), то, интегрируя по частям, имеем

$$\int \sum_i (\nabla A_i)^2\, d\boldsymbol{r} = -\int \sum_i A_i (\Delta A_i)\, d\boldsymbol{r} = 4\pi \sum_\tau k_\tau^2 q_\tau. \tag{209}$$

Подставляя соотношения (208) и (209) в выражение для энергии U (ур. (188)), находим

$$U = \frac{1}{2} \sum_\tau (p_\tau^2 + k_\tau^2 q_\tau^2) = H_{\text{гау}}.$$

§ 25. Гамильтониан излучения, взаимодействующего с частицами

В общем случае можно взять в качестве канонических переменных, с одной стороны, введенные в предыдущем параграфе q_τ, p_τ, которые описывают динамическое состояние излучения, а с другой стороны, координаты $\boldsymbol{R}_n$ и импульсы $\boldsymbol{P}_n$ частиц. Импульс $\boldsymbol{P}_n$ связан с механическим импульсом частицы соотношением (193).

Используя результаты § 22 (уравнение движения (182) и уравнения для силы Лоренца (185)—(187)), легко получить уравнения движения в новых переменных. В частности, уравнение (202) для свободного осциллятора перейдет в уравнение

$$\ddot{q}_\tau + k_\tau q_\tau = 4\pi \sum_n e_n (\boldsymbol{V}_n \boldsymbol{T}^{(\tau)}(n)). \tag{210}$$

$$(\boldsymbol{V}_n \equiv \dot{\boldsymbol{R}}_n;\ \boldsymbol{T}^{(\tau)}(n) \equiv \boldsymbol{T}^{(\tau)}(\boldsymbol{R}_n))$$

Полученным уравнениям можно придать канонический гамильтонов вид с гамильтонианом

$$H \equiv H(q_\tau, p_\tau; \boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{P}_n) = H_{\text{гау}} + H_{\text{coul}} + \sum_n H_n, \tag{211}$$

где $H_{\text{гау}}$ — гамильтониан свободного электромагнитного поля (205), H_{coul} — кулоновский потенциал (197), H_n — энергия частицы с номером n, выраженная в канонических переменных

$$H_n \equiv \sqrt{(m_n^2 + (\boldsymbol{P}_n - e_n \boldsymbol{A}(n))^2}, \tag{212}$$

$$\boldsymbol{A}(n) = \sqrt{4\pi} \sum_\tau q_\tau \boldsymbol{T}^{(\tau)}(n). \tag{213}$$

Доказательство этого утверждения не составляет труда и предоставляется читателю.

Раздел IV. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

§ 26. Квантование свободного поля излучения. Фотоны

И сказал Бог: «Да будет свет!» И был свет.
И увидел Бог, что свет хорош... Был день первый.

Квантовую теорию электромагнитного излучения можно построить, исходя из классической теории и используя принцип соответствия, так же как это было сделано в случае скалярного поля.

В качестве исходного пункта мы выберем гамильтонов формализм, который был развит в §§24 и 25.

Рассмотрим вначале свободное излучение. Вещественным динамическим переменным классической теории q_τ, p_τ соответствуют квантовые наблюдаемые, которые удовлетворяют коммутационным соотношениям (см. ур. (11))

$$[q_\tau, q_{\tau'}] = [p_\tau, p_{\tau'}] = 0, \quad [q_\tau, p_{\tau'}] = i\delta_{\tau\tau'}.$$

Уравнения (203) и (205) определяют оператор $H_{\text{гау}}$ — гамильтониан, который описывает развитие системы с течением времени. Видно, что излучение, в согласии с законом Планка, представляет собой суперпозицию квантовых осцилляторов.

Обсуждение, которое было проведено в § 3, можно повторить и в данном случае, в частности, ту часть, которая касается корпускулярной интерпретации. Кванты излучения называются *фотонами*. С каждой модой τ связан фотон, который характеризуется «волновой функцией» $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ и энергией k_τ. Фотоны подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна, что находится в прекрасном согласии с экспериментальными результатами, относящимися к термодинамическим свойствам излучения (излучение абсолютно черного тела и т. д.). Замечания в конце § 3 об энергии вакуума и вакуумных флуктуациях поля можно повторить без изменения и в этом случае.

Использованный метод не зависит от набора базисных векторных полей $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$, однако эти поля предполагались вещественными. Можно привести такую формулировку метода, чтобы он годился для комплексных полей $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ и дословно повторить рассуждения § 5 о квантовании с использованием комплексных полей. Легко написать общие формулы, но мы здесь этого делать не будем. Мы кратко обсудим разложение по сферическим волнам и более детально — разложение по плоским волнам. Среди возможных разложений последнее применяется чаще всего. Разложение по сферическим волнам удобно использовать в задачах об излучении и поглощении квантов.

§ 27. Плоские волны. Импульс излучения

Квантование электромагнитного поля, использующее разложение по плоским волнам, аналогично приведенному в § 6 квантованию скалярного поля. В данном параграфе мы ограничимся только наиболее важными формулами, отмечая в процессе изложения отличие от случая скалярного поля.

Рассмотрим полный набор поперечных плосковолновых полей. Для того чтобы иметь дело с дискретными индексами, будем рассматривать эти поля в кубе со стороной L и потребуем выполнения обычных условий периодичности. Принадлежащее этому набору поле $\boldsymbol{U}^{(k\omega)}$ определяется волновым вектором $\boldsymbol{k}$ и квантовым числом ω — параметризующим поляризацию ($\omega = 1, 2$)

$$\boldsymbol{U}^{(k\omega)} = L^{-3/2}\boldsymbol{\varepsilon}^{(\omega)}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}. \tag{214}$$

Выражение для $\boldsymbol{T}^{(k\omega)}$ из § 21 (ур. (173б)) отличается от данного только нормировкой. Векторы $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}$ удовлетворяют уравнениям (174), которые определяют эти векторы с точностью до унитарного преобразования.

Сопоставим каждой плоской волне $\boldsymbol{U}^{(k\omega)}$ оператор уничтожения $a_{(k\omega)}$ и оператор рождения $a^{\dagger}_{(k\omega)}$. Поле $\boldsymbol{A}$ зададим разложением (см. ур. (46) и (206))

$$\boldsymbol{A} = \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\omega}(2\pi/k)^{1/2}\left(a_{(k\omega)}\boldsymbol{U}^{(k\omega)} + a^{\dagger}_{(k\omega)}\boldsymbol{U}^{(k\omega)*}\right), \tag{215}$$

а поле $\mathscr{E}_{\perp}$ (см. ур. (47) и (207)) — разложением

$$\mathscr{E}_{\perp} = \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\omega} i(2\pi k)^{1/2}\left(a_{(k\omega)}\boldsymbol{U}^{(k\omega)} - a^{\dagger}_{(k\omega)}\boldsymbol{U}^{(k\omega)*}\right). \tag{216}$$

Операторы a и $a^{\dagger}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям, характеризующим операторы рождения и уничтожения:

$$[a_{(k\omega)}, a_{(k'\omega')}] = [a^{\dagger}_{(k\omega)}, a^{\dagger}_{(k\omega)}] = 0, \quad [a_{(k\omega)}, a^{\dagger}_{(k\omega)}] = \delta_{kk'}\delta_{\omega\omega'}. \tag{217}$$

Оператор числа фотонов, находящихся в состоянии $U^{(k\omega)}$, есть

$$N_{(k\omega)} \equiv a^{\dagger}_{(k\omega)}a_{(k\omega)}. \tag{218}$$

Гамильтониан электромагнитного поля, выбранный таким образом, чтобы энергия вакуума была равна нулю, определяется равенством

$$H_{\text{гау}} = \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\omega} N_{(k\omega)}k. \tag{219}$$

Оператор импульса $\boldsymbol{X}$ выражается через операторы $\mathscr{E}_{\perp}$ и $\boldsymbol{A}$ по формуле (189). Подставляя в эту формулу разложения (216) и (215), получаем (задача 6)

$$\boldsymbol{X} = \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\omega} N_{(k\omega)}\boldsymbol{k}. \tag{220}$$

Из приведенных выражений (219) и (220) видно, что фотон в состоянии $U^{(k\omega)}$ представляет собой частицу с импульсом k и энергией k, т. е. частицу нулевой массы покоя с импульсом k.

Число состояний фотонов с импульсами, лежащими в интервале $(k, k+\delta k)$, равно $2(L/2\pi)^3\delta k$. Множитель 2 возник в силу линейной независимости состояний с различной поляризацией при данном импульсе ($\omega = 1$ или 2). Плотность $\rho_L(k)$ уровней энергии k при заданных направлениях импульса Ω и поляризации ω (определение § 6) равна (см. ур. (49))

$$\rho_L(k) = L^3k^2/(2\pi)^3. \tag{221}$$

§ 28. Поляризация

Фотоны с одинаковым импульсом k могут иметь различную поляризацию. В классической теории поляризация определяет направление осцилляций поперечного электрического поля и фиксируется (с точностью до фазы) вещественным или комплексным единичным вектором, перпендикулярным направлению распространения k. Такое определение поляризации без труда переносится и на случай квантовой теории. Каждому значению импульса отвечают две линейно независимые поляризации $\varepsilon^{(1)}$ и $\varepsilon^{(2)}$ и любая другая возможная поляризация фотона задается линейной комбинацией таких поляризаций [1]).

В качестве базиса можно выбрать две *ортогональных линейных поляризации*, т. е. два вещественных вектора $\varepsilon^{(1)}$ и $\varepsilon^{(2)}$. Эти векторы можно выбрать таким образом, чтобы тройка $\varepsilon^{(1)}$, $\varepsilon^{(2)}$ и k образовывала орты правоориентированной декартовой системы координат, что фиксирует $\varepsilon^{(1)}$ и $\varepsilon^{(2)}$ с точностью до вращений вокруг оси распространения

$$\varepsilon^{(\omega)} = \varepsilon^{(\omega)*}, \quad \varepsilon^{(1)} \times \varepsilon^{(2)} = k/k.$$

Используют также в качестве базиса *круговые поляризации* $e^{(+)}$ и $e^{(-)}$

$$e^{(+)} = -\frac{\sqrt{2}}{2}(\varepsilon^{(1)} + i\varepsilon^{(2)}), \quad e^{(-)} = \frac{\sqrt{2}}{2}(\varepsilon^{(1)} - i\varepsilon^{(2)}). \tag{222}$$

Отметим, что $e^{(+)} = -e^{(-)*}$. Символом $\wedge$ будем обозначать величины, выраженные в этом базисе. Так можно определить операторы рождения $\hat{a}^+_{(k\eta)}$ и уничтожения $\hat{a}_{(k\eta)}$ фотонов с круговой поляризацией; соответствующая плоская волна равна

$$\hat{U}^{(k\eta)} = L^{-3/2}e^{(\eta)}e^{ikr} \quad (\eta = + \text{ или } -).$$

[1]) Мы рассматриваем только чистые состояния, которые называют также *полностью поляризованными*. Состояние *частично поляризованное* является статистической смесью, оно определяется оператором плотности, действующим в (двумерном) пространстве состояний поляризации.

Интерес к круговой поляризации вызван следующим свойством.

Фотон с круговой поляризацией имеет определенное значение момента импульса вдоль направления распространения, соответствующая компонента момента импульса равна $+1$ *или* -1 *в зависимости от поляризации (правой* $\eta = +$ *или левой* $\eta = -$*).*

Для доказательства предположим, что излучение находится в одном из состояний $|\boldsymbol{k}\pm\rangle$, определяемых равенством

$$|\boldsymbol{k}\pm\rangle \equiv \hat{a}^{\dagger}_{(\boldsymbol{k}\pm)}|0\rangle.$$

Такое состояние представляет фотон с импульсом $\boldsymbol{k}$ и правой $(+)$ или левой $(-)$ круговой поляризацией. Можно показать (задача 8), что

$$(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{G}^{(0)})\,|\boldsymbol{k}\pm\rangle = 0, \tag{223}$$

$$(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{G}^{(s)})\,|\boldsymbol{k}\pm\rangle = (\pm\, k)\,|\boldsymbol{k}\pm\rangle, \tag{224}$$

где векторные операторы $\boldsymbol{G}^{(0)}$ и $\boldsymbol{G}^{(s)}$ определены равенствами (191а) и (191б). Согласно уравнению (190) полный момент импульса $\boldsymbol{G}$ равен сумме этих операторов. Обозначая компоненту $\boldsymbol{G}$ вдоль вектора $\boldsymbol{k}$ через G_k

$$G_k = (\boldsymbol{k}\boldsymbol{G})/k$$

и используя предыдущие уравнения, получаем требуемый результат

$$G_k\,|\boldsymbol{k}\pm\rangle = (\pm\,1)\,|\boldsymbol{k}\pm\rangle. \quad \blacksquare$$

Это свойство характеризует частицу спина 1. Точнее, если частица спина 1 имеет определенное значение импульса $\boldsymbol{k}$, то компонента орбитального момента импульса вдоль $\boldsymbol{k}$ исчезает, а соответствующая компонента спина может принимать три значения: 1, 0, -1. Однако в случае фотона продольные плоские волны, отвечающие нулевому значению компоненты спина, отсутствуют.

§ 29. Разложение по мультиполям. Фотоны с определенным моментом импульса и четностью

Кроме разложения по плоским волнам можно использовать разложение по сферическим волнам, каждая из которых отвечает вполне определенному значению момента импульса и четности. Мы ограничимся тем, что приведем здесь основные формулы, опуская несложные доказательства.

Векторное поле $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ можно рассматривать как трехкомпонентную волновую функцию, определяющую динамическое со-

стояние частицы спина 1. В представлении поля $\boldsymbol{B}$ посредством компонент существует некоторый произвол. Например, можно было бы задавать B_x, B_y, B_z, однако для нас предпочтительнее использовать стандартные компоненты

$$B_+ = -\frac{\sqrt{2}}{2}(B_x - iB_y), \quad B_0 = B_z, \quad B_- = \frac{\sqrt{2}}{2}(B_x + iB_y).$$

Волновая функция зависит от координаты $\boldsymbol{r}$ и индекса μ, который параметризует рассматриваемые компоненты ($\mu = +, 0, -$)

$$\Psi(\boldsymbol{r}, \mu) \equiv B_\mu(\boldsymbol{r}).$$

Здесь можно отметить явную параллель между частицами спина 1 и частицами спина 1/2 (см. §§ XIII. 20—21).

Наблюдаемые для частицы спина 1 являются функциями ее координаты $\boldsymbol{r}$, импульса $\boldsymbol{p}$ и спина $\boldsymbol{s}$. В используемом нами представлении $\boldsymbol{p} = -i\nabla$ матрицы компонент спина s_+, s_z, s_- определены уравнениями (XIII.28), в которых следует считать $j = j' = 1$. Легко показать, что $s^2 = 2$ — число, соответствующее моменту, равному 1.

Орбитальный момент импульса $\boldsymbol{l}$ частицы определяется формулой

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p},$$

а полный момент $\boldsymbol{j}$ равен

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}.$$

Компоненты оператора $\boldsymbol{j}$ связаны с инфинитезимальными вращениями векторного поля в соответствии с обычным определением оператора момента импульса.

Аналогичным образом определим оператор четности P, действие которого на поле $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ соответствует преобразованию отражения относительно начала координат [1])

$$PB_\mu(\boldsymbol{r}) = -B\ (-\boldsymbol{r}).$$

Построим полный набор векторных полей с заданным моментом импульса (jm), которые удовлетворяют волновому уравнению

$$(\Delta + k^2)\,\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = 0.$$

Это эквивалентно отысканию набора общих собственных функций операторов $\boldsymbol{p}^2$, $\boldsymbol{j}^2$ и j_z. Соответствующие собственные значе-

[1]) Мы предполагаем, что значениями поля $B(r)$ являются полярные векторы. В результате появляется знак минус при пространственном отражении. С точностью до знака четности все приводимые ниже свойства справедливы и для аксиальных векторных или псевдовекторных полей (см. сноску в § XX. 11).

ния обозначим k^2, $j(j+1)$ и m; k может быть любым вещественным числом от 0 до ∞ (спектр k можно сделать дискретным, рассматривая поле внутри сферы конечного радиуса R), j может принимать любое целое значение от 0 до ∞, m — целые значения от $-j$ до $+j$.

Используя свойства сложения моментов импульса, можно показать, что операторы $\boldsymbol{p}^2$, $\boldsymbol{l}^2$, j^2, j_z образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых и каждой тройке (kjm) отвечают:

(i) если $j \neq 0$, *три* линейно независимых состояния:

$$l = j+1,\ j,\ j-1;$$

(ii) если $j = 0$, то *одно и только одно* состояние с $l = 1$. Эти состояния имеют определенную четность $P = (-1)^{l+1}$.

Вместо классификации состояний (kjm) по возможным значениям l, можно классифицировать их по свойствам поперечности или продольности и четности. Поперечный или продольный характер поля связан с оператором $(\boldsymbol{sp})$.

В используемом представлении имеем (ур. (XIII. 93))

$$(\boldsymbol{sp}) = \mathrm{rot},$$

$$(\boldsymbol{sp})^2 - \boldsymbol{p}^2 = \mathrm{grad\ div}\ (= \mathrm{rot\ rot} + \Delta).$$

Для продольного поля $(\boldsymbol{sp})^2 = 0$, для поперечного поля $(\boldsymbol{sp})^2 - \boldsymbol{p}^2 = 0$. Можно показать, что операторы $\boldsymbol{p}^2$, $(\boldsymbol{sp})^2$, P, $\boldsymbol{j}^2$ и j_z образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, и каждой тройке (kjm) отвечают:

(i) если $j \neq 0$, *три* линейно независимых состояния

$$(\boldsymbol{sp})^2 = 0, \qquad k^2, \qquad k^2,$$
$$P = (-1)^j, \quad (-1)^j, \quad (-1)^{j+1};$$

(ii) если $j = 0$, то *одно и только одно* состояние — четное и продольное

$$(\boldsymbol{sp})^2 = 0, \quad P = +1$$

(т. е. уже упоминавшееся p-состояние).

Для построения базисных функций будем использовать функции u_{kjm}, которые были введены в § 7 при рассмотрении скалярного поля. Константу в определении (60) будем считать такой функцией k, что множество u_{kjm} образует полный ортонормированный набор скалярных функций. Каждому набору (kjm) отвечает одно и только одно продольное состояние. Соответствующая базисная функция равна

$$\Lambda_{kjm} \equiv \mathrm{grad}\, u_{kjm}/k$$

(векторное поле четности $(-1)^j$). Каждому набору (kjm), исключая случай $j = m = 0$, отвечают два поперечных состоя-

ния противоположной четности. Соответствующие базисные функции равны [1])

$$\boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{kjm} = l\boldsymbol{u}_{kjm}/\sqrt{j(j+1)} \quad (P=(-1)^{j+1}), \tag{225а}$$

$$\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{kjm} = \nabla \times l\boldsymbol{u}_{kjm}/k\sqrt{j(j+1)} \quad (P=(-1)^{j}). \tag{225б}$$

Отметим, что

$$\boldsymbol{\Theta}^{(\pm)}_{kjm} = \operatorname{rot} \boldsymbol{\Theta}^{(\mp)}_{kjm}/k.$$

Множество полей $\boldsymbol{\Theta}^{(\omega)}_{kjm}$ (k меняется от 0 до ∞; $j=1, 2, \ldots, \ldots, \infty$; $m=-j, \ldots, +j$; $\omega=+, -$) образует полный ортонормированный набор поперечных полей, которые можно использовать для разложений операторов $\boldsymbol{A}$ и $\mathscr{E}_\perp$:

$$\boldsymbol{A} = \sum_{k,\,j,\,m,\,\omega} (2\pi/k)^{1/2} [a^{(\omega)}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\omega)}_{kjm} + a^{(\omega)\dagger}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\omega)*}_{kjm}], \tag{226}$$

$$\mathscr{E}_\perp = \sum_{k,\,j,\,m,\,\omega} (2\pi k)^{1/2}\, i [a^{(\omega)}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\omega)}_{kjm} - a^{(\omega)\dagger}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\omega)*}_{kjm}]. \tag{227}$$

Согласно принятой терминологии слагаемые $\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{kjm}$ в этих разложениях отвечают *электрическому* 2^j*-польному* вкладу, а слагаемые $\boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{kjm}$ — *магнитному* 2^j*-польному* вкладу. Все рассуждения § 27, где рассматривалось разложение по плоским волнам, можно повторить здесь для разложения по мультиполям. Операторы $a^{(\omega)}_{kjm}$ и $a^{(\omega)\dagger}_{kjm}$ можно интерпретировать как операторы уничтожения и рождения фотонов с энергией k, моментом импульса (jm) и четностью $(-1)^j\omega$. Спектры значений k, j, m и ω уже приводились ранее, следует отметить только, что не существует фотонов с нулевым моментом импульса.

§ 30. Взаимодействие с атомной системой

> И сказал Бог: «Да будут светила на тверди небесной для отделения дня от ночи...»
>
> И увидел Бог, что это хорошо... Был день четвертый.

Рассмотрим взаимодействие излучения с системой частиц. Рассуждения будут подобны тем, которые проводились в случае скалярного поля, и мы выделим здесь только наиболее существенные пункты.

---

[1]) Четности этих функций отличаются знáком от тех, которые встречаются в большинстве монографий (см., в частности *Блатт* и *Вайскопф*, loc. cit.). Это связано с тем, что мы используем полярные векторные поля, в то время как другие авторы используют аксиальные.

Гамильтониан системы, с точностью до очевидных модификаций, совпадает с гамильтонианом классической теории (см. ур. (211)). Упомянутые изменения связаны с динамическими свойствами и спином рассматриваемых частиц. Мы ограничимся случаем атомной системы, состоящей из Z электронов и ядра с зарядом $-Ze$, где e — заряд электрона.

Предположим, что ядро отсутствует, и напишем гамильтониан системы из Z электронов + излучение. Такой гамильтониан дается формулой (211), где H_{rad} соответствует свободному излучению, H_{coul} — кулоновскому взаимодействию электронов и H_n — гамильтониан Дирака для n-го электрона в поле $\boldsymbol{A}$, т. е.

$$H_n = \alpha_n (\boldsymbol{P}_n - e\boldsymbol{A}(n)) + \beta_n m, \tag{228}$$

матрицы Дирака α_n и β_n относятся к n-му электрону.

В нерелятивистском приближении, вычитая массу покоя из H_n, получаем

$$(H_n)_{NR} = \frac{(\boldsymbol{P}_n - e\boldsymbol{A}(n))^2}{2m} - \frac{e}{2m}(\sigma_n \mathcal{H}(n)). \tag{229}$$

Отметим, что слагаемое в H_n (ур. (228)), описывающее взаимодействие электрона с излучением, имеет вид

$$H_n' = -e\int (j_n(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))\,d\boldsymbol{r}, \tag{230}$$

где $j_n(\boldsymbol{r})$ — дираковская плотность потока электронов в точке $\boldsymbol{r}$, т. е. (см. ур. (XX. 143))

$$j_n(\boldsymbol{r}) \equiv \alpha_n \delta(\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{r}). \tag{231}$$

Величина $ej_n(r)$ есть плотность электрического тока для n-го электрона. Подставляя в формулу (230) нерелятивистское приближение для j_n (ур. (189), (190)), получаем оператор взаимодействия $(H_n')_{NR}$ в нерелятивистском приближении

$$(H_n')_{NR} \equiv H_n^{(\mathrm{I})} + H_n^{(\mathrm{II})} + H_n'', \tag{232}$$

$$H_n^{(\mathrm{I})} = -\frac{e}{2m}((\boldsymbol{P}_n\boldsymbol{A}(n)) + (\boldsymbol{A}(n)\,\boldsymbol{P}_n)), \tag{233а}$$

$$H_n^{(\mathrm{II})} = -i\frac{e}{2m}[\sigma_n((\boldsymbol{P}_n \times \boldsymbol{A}(n)) + (\boldsymbol{A}(n) \times \boldsymbol{P}_n))] = -\frac{e}{2m}(\sigma_n \mathcal{H}(n)), \tag{233б}$$

$$H_n'' = \frac{e}{2m}\boldsymbol{A}^2(n). \tag{233в}$$

Таким образом, мы пришли к выражению для взаимодействия электрона с излучением, которое фигурирует в формуле (229).

Наличие атомного ядра заставляет нас добавить к гамильтониану оператор кулоновского взаимодействия ядра и Z электронов и гамильтониан, описывающий ядро в электромагнитном поле. Последний гамильтониан состоит из двух слагаемых, соответствующих кинетической энергии ядра и взаимодействию с излучением [1]). В нерелятивистском приближении, когда ядро предполагается бесконечно тяжелым, эти два слагаемых пренебрежимо малы, и расположенное в начале координат ядро требует добавления к гамильтониану только Z кулоновских членов $-Ze^2/R_n$. В этом случае атом рассматривается как система, состоящая из Z электронов во внешнем кулоновском потенциале $-Ze^2/R$, которые взаимодействуют с электромагнитным полем. Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$H = H_{\text{ray}} + H_{\text{at}} + H', \tag{234}$$

где H_{ray} — оператор энергии свободного излучения, H_{at} — гамильтониан электронов во внешнем кулоновском поле ядра с кулоновским взаимодействием между электронами и H' — оператор взаимодействия электронов атома с излучением. Оператор H' равен сумме Z членов взаимодействия H'_n (см. ур. (230)). В дальнейшем мы будем использовать нерелятивистское приближение, и, следовательно, H'_n определяется формулами (232) и (233), т. е.

$$H' = H^{(\text{I})} + H^{(\text{II})} + H'', \tag{235}$$

$$H^{(\text{I})} = \sum_n H_n^{(\text{I})}, \quad H^{(\text{II})} = \sum_n H_n^{(\text{II})}, \quad H'' = \sum_n H''_n. \tag{235'}$$

При исследовании такой системы обычно пользуются одним из двух приближенных методов.

В первом методе *электромагнитное поле считают классическим*. Это предположение оправдано в тех случаях, когда обмен энергией между атомом и полем столь велик по сравнению с энергией каждого испущенного или поглощенного фотона, что можно не учитывать дискретного характера этого обмена. Следовательно, таким приближением можно пользоваться при больших интенсивностях и малых частотах, когда присутствует много фотонов. В частности, метод годится для исследования атома в статическом электромагнитном поле или в поле радиоволнового диапазона. В этом случае электромагнитное поле рассматривается как заданное, возможно, зависящее от времени внешнее поле, и задача сводится к исследованию атома во внешнем поле.

[1]) Предполагается, что ядро может рассматриваться как точечный заряд. Такое рассмотрение оправдано до тех пор, пока участвующие в анализе частоты малы по сравнению с энергией возбуждений ядра.

При втором методе *оператор взаимодействия H' рассматривают как малое возмущение.* Мы уже пользовались этим методом в случае скалярного поля.

Рассуждения § 10 здесь можно повторить почти дословно. Невозмущенный гамильтониан имеет вид

$$H_0 \equiv H_{\text{ray}} + H_{\text{at}}.$$

Для применения теории возмущений нужно использовать представление, в котором оператор H_0 диагонален. Воспользовавшись определенным в § 27 представлением плоских волн для электромагнитного поля, мы определим базисные векторы H_0 как одновременные собственные векторы оператора H_{at} и операторов числа фотонов с заданным импульсом и поляризацией $N_{(k\omega)}$.

Матричные элементы H' в этом представлении легко вычислить, если использовать выражение этого оператора через операторы $a_{(k\omega)}$ и $a^+_{(k\omega)}$. Подставляя разложение для A (215) в выражение (233), находим

$$H_n^{(\text{I})} = -\frac{e}{m}\sum_s \left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2} (a_s (\boldsymbol{P}\boldsymbol{\varepsilon})\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} + \text{эрм. сопр.}), \tag{236а}$$

$$H_n^{(\text{II})} = -\frac{e}{2m}\sum_s \left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2} (ia_s (\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\varepsilon})\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} + \text{эрм. сопр.}), \tag{236б}$$

$$H_n'' = \frac{e^2}{2m}\sum_s\sum_{s'} \frac{\pi}{\sqrt{kk'L^3}} \left((a_s a_{s'} (\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')\, e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\boldsymbol{R}} + \text{эрм. сопр.}) + \right.$$
$$\left. + (a_s^+ a_{s'} (\boldsymbol{\varepsilon}^*\boldsymbol{\varepsilon}')\, e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\boldsymbol{R}} + \text{эрм. сопр.})\right). \tag{237}$$

(Чтобы упростить запись, мы ввели обозначения $s \equiv (\boldsymbol{k}\omega)$, $s' \equiv (\boldsymbol{k}'\omega')$, а векторы $\boldsymbol{R}_n$, $\boldsymbol{P}_n$, $\boldsymbol{\sigma}_n$, $\boldsymbol{\varepsilon}^{(\omega)}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^{(\omega')}$ записали как $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\varepsilon}'$.) Полученные формулы и формулы (235), (235′) дают требуемое выражение для H'.

Добавление к гамильтониану H_0 оператора взаимодействия H' приводит к сдвигу всех атомных уровней и делает все уровни, за исключением основного состояния, нестабильными (напомним, что масса фотона равна нулю). Эти эффекты можно изучать в рамках теории возмущений. Однако несмотря на малость константы связи e ($e^2 \approx 1/137$) здесь встречаются те же трудности, что и в случае скалярного поля. В частности, как следствие локальности взаимодействия H' (см. ур. (230) и (231)) возникает «ультрафиолетовая катастрофа». Эта трудность устраняется из вычислений введением подходящего обрезающего параметра. По тем же причинам, что и выше, в качестве такого параметра выбирают частоту порядка m. Мы уже обсуждали вопросы, относящиеся к введению обрезающего па-

раметра и к трудностям, которые связаны с необходимостью перенормировки массы и заряда частиц. Весь материал раздела II о сдвиге уровней и свойствах квазистационарных состояний (время жизни, ширина линии, моды распада...) можно без больших изменений перенести на случай взаимодействия с электромагнитным полем [1]). Рассмотренные в разделе II задачи о столкновении можно исследовать в случае излучения теми же методами. Заканчивая эту главу, мы приведем два простых примера применения квантовой теории излучения: вычисление вероятности испускания фотона атомом и вычисление сечения комптоновского рассеяния в пределе низких частот.

§ 31. Излучение фотона атомом. Дипольное излучение

Рассмотрим атом, находящийся в одном из возбужденных состояний $|\lambda\rangle$ с энергией E_λ. Такой атом может перейти в любое из состояний $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \ldots$ с энергиями $E_\alpha, E_\beta, \ldots$, меньшими чем E_λ, и испустить при этом фотон, энергия которого равна разности энергий начального и конечного состояний.

Будем исследовать переход

$$\lambda \to \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\varepsilon},$$

где μ — конечное состояние атома, $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$ — импульс и поляризация испущенного фотона и

$$k = E_\lambda - E_\mu. \tag{238}$$

Вероятность перехода в единицу времени $w_{\lambda \to \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\varepsilon}}$ в первом порядке теории возмущений дается формулой (см. § 12)

$$w_{\lambda \to \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\varepsilon}} = 2\pi |\langle \lambda | H' | \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\varepsilon} \rangle|^2 (L^3 k^2/(2\pi)^3). \tag{239}$$

Как видно из уравнения (235), H' является суммой трех слагаемых. Вклад третьего члена H'' в интересующий нас матричный элемент исчезает [2]). Вклады первого и второго членов легко

[1]) Изменения связаны с тем, что фотоны представляют собой частицы нулевой массы и спина 1. Тот факт, что масса фотона равна нулю, приводит к дополнительным трудностям. Кроме «ультрафиолетовой» возникает «инфракрасная катастрофа» — расходимость в области низких частот некоторых интегралов теории возмущений по заряду. Эти расходимости связаны непосредственно с используемым методом и их можно избежать, если модифицировать теорию возмущений. «Ультрафиолетовая катастрофа» представляет действительную трудность собственно теории, полностью удовлетворительного решения которой в настоящее время не существует.

[2]) Действуя на состояния, H'' либо сохраняет число фотонов, либо увеличивает или уменьшает это число на две единицы. Отметим, что H'' содержит множителем e^2, и, следовательно, при вычислении по теории возмущений в первом порядке по e этот оператор можно не учитывать. При вычислении сдвига уровней, который является эффектом второго порядка (см. § 11), вкладом H'' нельзя пренебрегать. Его необходимо учитывать также при вычислении рассеяния фотонов (см. § 32).

вычислить, используя выражения (236). В результате имеем

$$\langle \lambda \,|\, H^{(\mathrm{I})} \,|\, \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = -\frac{e}{m}\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2} F^{(\mathrm{I})}, \tag{240а}$$

$$\langle \lambda \,|\, H^{(\mathrm{II})} \,|\, \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{ie}{m}\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2} F^{(\mathrm{II})}, \tag{240б}$$

где

$$F^{(\mathrm{I})} \equiv \langle \lambda \,|\, \sum_n (\boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{P}_n)\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}_n} \,|\, \mu \rangle, \tag{241а}$$

$$F^{(\mathrm{II})} \equiv \langle \lambda \,|\, \frac{1}{2} \sum_n (\boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}_n)\, e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}_n} \,|\, \mu \rangle. \tag{241б}$$

Подставляя полученные выражения в формулу (239), окончательно находим

$$w_{\lambda \to \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{e^2 k}{2\pi m^2} \left| F^{(\mathrm{I})} - iF^{(\mathrm{II})} \right|^2. \tag{242}$$

Для атомов вероятность перехода по порядку величины существенно зависит от моментов импульса j_λ, j_μ и от четностей Π_λ, Π_μ состояний $|\lambda\rangle$, $|\mu\rangle$ соответственно.

Если $j_\lambda = j_\mu = 0$, то вероятность перехода исчезает, поскольку матричные элементы $F^{(\mathrm{I})}$ и $F^{(\mathrm{II})}$ тождественно равны нулю (задача 10). Это — известное правило отбора $0 \to 0$. Оно связано с тем, что не существует фотона с нулевым моментом импульса (см. § 29).

Если j_λ или j_μ отличны от нуля, то вероятность перехода можно оценить, используя приближение больших длин волн. Пусть R — длина порядка атомных размеров для обычных атомных переходов

$$k \lesssim e^2/R \approx me^4,$$

так что

$$kR \lesssim e^2 \ll 1.$$

Следовательно, величины (241) можно оценить, если заменить экспоненты первым, дающим неисчезающий вклад членом их ряда Тейлора. Порядок величины этого вклада в основном определяется *правилами отбора* по моменту импульса и четности, но вникать в эти детали мы здесь не будем [1]). При прочих рав-

[1]) Более естественным образом эти результаты получаются при использовании разложения по мультиполям, а не по плоским волнам. В этом случае из правил отбора следует, что большинство вкладов обращается в нуль, а оставшиеся вклады легко оценить, заменяя мультипольные поля $\boldsymbol{\Theta}$ первым членом их разложения по степеням kr. Отметим (см. ур. (225)), что при $kr \ll 1$

$$\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{klm} \approx (kr)^{l-1}, \quad \boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{klm} \approx (kr)^{l}.$$

Подробное изложение этого метода с приложением к радиационным переходам в ядрах можно найти в книге: *Д. Блатт, В. Вайскопф.* Теоретическая ядерная физика. М., ИЛ, 1954 (гл. XII).

ных условиях наибольшая вероятность перехода получается для так называемых *электрических дипольных* переходов, когда

$$\Delta j \equiv |j_\lambda - j_\mu| \leqslant 1, \quad \Delta\Pi \equiv \Pi_\lambda \Pi_\mu = -1 \tag{243}$$

(исключая $j_\lambda + j_\mu = 0$).

Далее следуют магнитные дипольные ($\Delta j \leqslant 1$, $\Delta\Pi = 1$, $j_\lambda + j_\mu \neq 0$) и электрические квадрупольные ($\Delta j \leqslant 2$, $\Delta\Pi = 1$, $j_\lambda + j_\mu \neq 0$ или 1) переходы, порядок величины которых в $(kR)^{-2}$ раз меньше электрических дипольных переходов.

Если выполнены условия для электрического дипольного излучения (243), то мы можем записать

$$F^{(\mathrm{I})} \approx \langle \lambda | \sum_n (\mathfrak{e}\boldsymbol{P}_n) | \mu \rangle,$$

$$F^{(\mathrm{II})} \approx \frac{1}{2} i \langle \lambda | \sum_n (\mathfrak{e}\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\sigma}_n)(\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}_n) | \mu \rangle.$$

Грубая оценка этих матричных элементов

$$F^{(\mathrm{I})} \approx 1/R, \quad F^{(\mathrm{II})} \approx k^2 R, \quad |F^{(\mathrm{II})}/F^{(\mathrm{I})}| \approx (kR)^2 \ll 1$$

показывает, что слагаемое $F^{(\mathrm{II})}$ значительно меньше $F^{(\mathrm{I})}$ и им можно пренебречь. Для вычисления $F^{(\mathrm{I})}$ удобно ввести электрический дипольный момент электронов

$$\boldsymbol{D} \equiv e \sum_n \boldsymbol{R}_n. \tag{244}$$

(Это векторный оператор, который мы в §§ XIII. 33 и XVII. 3 обозначали $\boldsymbol{Q}^{(1)}$ см. ур. (XVII. 35).)

Оператор $\boldsymbol{D}$ удовлетворяет уравнению

$$[\boldsymbol{D}, H_{\mathrm{at}}] = ie \sum_n \boldsymbol{P}_n/m.$$

Следовательно,

$$(ie/m)\langle \lambda | \sum_n \boldsymbol{P}_n | \mu \rangle = \langle \lambda | (\boldsymbol{D}H_{\mathrm{at}} - H_{\mathrm{at}}\boldsymbol{D}) | \mu \rangle =$$

$$= (E_\mu - E_\lambda)\langle \lambda | \boldsymbol{D} | \mu \rangle = -k \langle \lambda | \boldsymbol{D} | \mu \rangle,$$

откуда $F^{(\mathrm{I})} = imk \langle \lambda | (\boldsymbol{D}\,\mathfrak{e}) | \mu \rangle / e$ и

$$w_{\lambda \to \mu \mathfrak{k}\mathfrak{e}} = \frac{k^3}{2\pi} |\langle \lambda | (\boldsymbol{D}\mathfrak{e}) | \mu \rangle|^2. \tag{245}$$

Здесь удобно взять определенные магнитные квантовые числа m_λ и m_μ начального и конечного состояний и ввести в соответствии с определением (XIII. 125) приведенный матричный элемент $\langle \lambda \| \boldsymbol{D} \| \mu \rangle$. Если D_q есть q-я стандартная компонента векторного оператора $\boldsymbol{D}$, то согласно теореме Вигнера — Эккарта имеем

$$\langle j_\lambda m_\lambda | D_q | j_\mu m_\mu \rangle = (2j_\lambda + 1)^{-1/2} \langle j_\mu 1 m_\mu q | j_\lambda m_\lambda \rangle \langle \lambda \| \boldsymbol{D} \| \mu \rangle.$$

Поскольку $(\boldsymbol{\varepsilon D}) = \sum_q \varepsilon_q D_q$, где ε_q $(q = +, 0, -)$ есть стандартные компоненты вектора поляризации (определение (XIII. 94)), то окончательно получаем

$$w_{\lambda\to\mu k\varepsilon} = (k^3 |\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle|^2/2\pi)\left(|\sum_q \varepsilon_q \langle j_\mu 1 m_\mu q | j_\lambda m_\lambda\rangle|^2/(2j_\lambda+1)\right). \tag{246}$$

Если атом в начальном состоянии неполяризован и в конечном состоянии поляризация не измеряется, то нам следует просуммировать по m_μ и усреднить по m_λ, т. е.

$$\langle w_{\lambda\to\mu k\varepsilon}\rangle \equiv \frac{1}{2j_\lambda+1}\sum_{m_\lambda,\, m_\mu} w_{\lambda\to\mu k\varepsilon}.$$

Вычисления легко проделать, используя свойства симметрии и ортогональности коэффициентов Клебша — Гордана (см. ур. (В. 13в) и (В. 14а)), в результате получим

$$\langle w_{\lambda\to\mu k\varepsilon}\rangle = \frac{k^3 |\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle|^2}{6\pi(2j_\lambda+1)}.$$

Как и следовало ожидать, это выражение не зависит ни от направления излучения, ни от поляризации испущенного фотона. Полная вероятность перехода $\lambda\to\mu$ в единицу времени получается после суммирования по двум состояниям поляризации и интегрирования по направлениям излучения, т. е. после умножения этого выражения на 8π

$$w^{(\mathrm{tot})}_{\lambda\to\mu} = \frac{4k^3}{3(2j_\lambda+1)}|\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle|^2. \tag{247}$$

§ 32. Комптоновское рассеяние при низких энергиях. Формула Томсона

В качестве примера задачи рассеяния, отличной от приведенных в разделе II, но которая может быть решена теми же методами, рассмотрим комптоновское рассеяние (рассеяние фотонов свободными электронами) [1]).

В начальном состоянии системы имеются электрон с импульсом $\boldsymbol{P}_i$ и фотон с импульсом $\boldsymbol{k}_i$ и поляризацией $\boldsymbol{\varepsilon}_i$. Такое состояние представляется кет-вектором $|i\rangle \equiv |\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{\varepsilon}_i\rangle$. Нас интересует сечение рассеяния из начального состояния в конечное, которое содержит электрон и фотон с импульсами и поляризацией $\boldsymbol{P}_f$, $\boldsymbol{k}_f$, $\boldsymbol{\varepsilon}_f$ соответственно. Конечное состояние обозначим $|f\rangle \equiv |\boldsymbol{P}_f\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{\varepsilon}_f\rangle$. Энергия и импульс при рассеянии сохраняются.

[1]) Для скалярного поля сечение рассеяния кванта поля на свободной частице исчезает.

Для вычисления сечения рассеяния при всех энергиях электрон следует рассматривать как частицу, удовлетворяющую уравнению Дирака и взаимодействующую с излучением по закону $-e\alpha \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$. В этом параграфе мы ограничимся рассмотрением рассеяния в области малых частот [1]).

Пусть в начальном состоянии электрон покоится ($\boldsymbol{P}_i = 0$) и энергия налетающего фотона достаточно мала, чтобы переданная электрону в результате рассеяния энергия была мала по сравнению с его массой

$$k_i \ll m$$

(следовательно, $k_f \approx k_i$, $P_f \approx k_f$). В этом случае можно использовать нерелятивистское приближение для электрона и в качестве гамильтониана системы взять оператор

$$H = H_0 + H',$$

где

$$H_0 = H_{\text{гау}} + \frac{P^2}{2m}.$$

Согласно формуле (235) H' есть сумма трех слагаемых $H^{(\text{I})}$, $H^{(\text{II})}$ и H'', которые определяются уравнениями (236а), (236б) и (237) соответственно.

Для вычисления сечения рассеяния воспользуемся формулами теории рассеяния (глава XIX). Ясно, что все оговорки, сделанные в аналогичной задаче из § 14, остаются в силе и в данном случае. Мы не будем повторять их здесь, а предположим, как и в § 14, что формулы теории рассеяния применимы при условии замены в этих формулах массы электрона m на экспериментально измеряемую величину.

Непосредственное применение формализма теории рассеяния сталкивается с дополнительной трудностью, которая связана с невозможностью определить и отделить переменные центра масс. Однако трудность эта только кажущаяся. Отделение движения центра масс играет в нерелятивистской теории столкновений вспомогательную роль: в силу сохранения при столкновении полного импульса системы формулы становятся проще. Можно сформулировать теорию рассеяния, не прибегая к отделению движения центра масс, тогда закон сохранения импульса будет фигурировать в формулах явно.

Мы воспользуемся здесь такой формулировкой. Единственное изменение связано с определением амплитуды перехода

[1]) В общем случае задачу можно решить таким же методом (см. *Гейтлер*, loc. cit.) и получить формулу Клейна — Нишины. Вычисления будут несложными, но длинными. Их можно значительно сократить, если воспользоваться ковариантной формулировкой квантовой теории излучения (см. *Яух* и *Рорлих*, loc. cit.).

$T_{i\to f}$. Примем для T формальное определение

$$T \equiv H' + H' \frac{1}{E - H + i\varepsilon} H'.$$

Поскольку оператор T инвариантен относительно трансляций, то матричный элемент $\langle f|T|i\rangle$ пропорционален δ-функции, обеспечивающей закон сохранения полного импульса. Амплитуда перехода $T_{i\to f}$ определяется равенством

$$\langle f|T|i\rangle = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{P}_f + \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{k}_i) T_{i\to f}. \qquad (248)$$

Множитель $(2\pi)^3$ учитывает принятую нормировку плоских волн

$$\langle \boldsymbol{P}|\boldsymbol{P}'\rangle = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}').$$

При таких определениях сечение рассеяния дается общей формулой (XIX. 116).

Будем вычислять амплитуду перехода $\langle f|T|i\rangle$, раскладывая T в ряд по степеням e и ограничиваясь только низшим нетривиальным порядком, т. е. e^2:

$$\langle f|T|i\rangle = \langle f|H''|i\rangle + \\ + \langle f|(H^{(I)} + H^{(II)}) \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} (H^{(I)} + H^{(II)})|i\rangle + O(e^4). \qquad (249)$$

Из выражений (236а, б) и (237) видно, что каждое слагаемое в правой части содержит множитель

$$\int e^{i(\boldsymbol{P}_i + \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{P}_f - \boldsymbol{k}_f)R} d\boldsymbol{R} = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{P}_f + \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{k}_i).$$

Это и есть упоминавшийся выше множитель, выражающий закон сохранения импульса. Используя выражение (237), получаем

$$\langle f|H''|i\rangle = \frac{2\pi e^2}{mkL^3} (\boldsymbol{e}_f^* \boldsymbol{e}_i) \int e^{i(\boldsymbol{P}_i + \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{P}_f - \boldsymbol{k}_f)R} d\boldsymbol{R}, \qquad (250)$$

где $k = (k_i k_f)^{1/2}$. Поскольку мы интересуемся только областью малых частот, то членами порядка k/m по сравнению с единицей пренебрегаем и можем считать

$$k_i \approx k_f \approx k.$$

Легко показать, что вклад второго слагаемого в правой части уравнения (249) порядка k/m по сравнению с вкладом первого слагаемого. Таким образом, в данном приближении ($e^2 \ll 1$, $k \ll m$) имеем

$$T_{i\to f} = \frac{2\pi e^2}{mkL^3} (\boldsymbol{e}_f^* \boldsymbol{e}_i). \qquad (251)$$

Следовательно, сечение рассеяния (см. ур. (116)) равно

$$\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega} = 2\pi L^3 \left| T_{i\to f} \right|^2 (L^3 k^2/(2\pi)^3) = \frac{e^4}{m^2} \left| (\mathbf{e}_f^* \mathbf{e}_i) \right|^2. \qquad (252)$$

Чтобы получить сечение рассеяния неполяризованных фотонов, следует усреднить по двум возможным начальным поляризациям и просуммировать по двум конечным поляризациям. Вводя обозначение θ для угла рассеяния фотона ($\cos\theta = (\mathbf{k}_i \mathbf{k}_f)/k^2$), получаем

$$\left.\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega}\right|_{\text{неполяр}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{e}_i,\, \mathbf{e}_f} \frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega} = \frac{1}{2} \frac{e^4}{m^2} (1 + \cos^2\theta). \qquad (253)$$

Интегрируя по всем направлениям излучения, приходим к формуле для полного сечения рассеяния фотонов

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m^2}. \qquad (254)$$

Эти результаты хорошо согласуются с экспериментальными наблюдениями.

Выражения (252)—(254) совпадают с теми, которые получаются в классической теории излучения [1]). В частности, для полного сечения мы получили *классическую формулу Томсона*. Такое совпадение результатов двух теорий убеждает нас в справедливости сказанного в § I. 5 о значении и пределах применимости классической теории эффекта Комптона. Очевидно, что классическая теория не может учесть корпускулярный характер излучения и тот факт, что обмен импульсом и энергией между излучением и электроном осуществляется посредством квантов. Но эта теория правильно предсказывает целый ряд характеристик, таких как среднее значение за единицу времени и на единичный падающий поток переданного электрону импульса (ур. (254)), угловое распределение и поляризацию рассеянного излучения (ур. (252)), а также, при учете эффекта Допплера, изменение длины волны рассеянного излучения (ур. (I. 5) и (I. 6)).

Полное совпадение результатов двух теорий происходит только в пределе малых частот, когда длина волны электромагнитного излучения $1/k$ настолько велика, что процесс рассеяния практически не зависит от внутренней структуры электрона. Поскольку электрон является квантовым объектом, то его раз-

[1]) В эти формулы не входит постоянная Планка $\hbar$. Каждая из формул содержит множителем квадрат классического радиуса электрона $r_0 = e^2/mc^2$. Например, выражение (252) можно записать как $r_0^2 \cos^2\alpha$, где α — угол между направлениями начальной и конечной поляризаций (предполагается их линейность).

меры порядка $1/m$, и эффекты, обусловленные его структурой [1]), по порядку величины равны k/m. В нерелятивистском пределе они определяются вторым слагаемым в выражении (249). С ростом энергии налетающего фотона квантовая природа электрона проявляется все отчетливее, становится все более существенной для описания процесса рассеяния и наблюдаются растущие и ярко выраженные отклонения от предсказаний классической теории.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пусть $\Phi(r)$ — вещественное скалярное поле, которое было введено в разделе I, и мы хотим измерить интеграл от этой наблюдаемой по конечной области. Точнее, рассмотрим интеграл

$$\hat{\Phi} \equiv \int \Phi(r)\, P(r)\, dr,$$

где $P(r)$ — вещественная неотрицательная функция, интеграл от которой по всему пространству равен 1. Положим

$$\chi(\varkappa) \equiv \int \exp(i\varkappa r)\, P(r)\, dr \quad (\chi(0) = 1).$$

Показать, что статистическое распределение $\hat{\Phi}$ по вакуумному состоянию является гауссовым и что

$$(\Delta\hat{\Phi})^2 = \int \frac{|\chi(\varkappa)|^2}{16\pi^3 (\mu^2 + \varkappa^2)^{1/2}}\, d\varkappa.$$

В частности, если весовая функция $P(r)$ сосредоточена в области с линейными размерами a и $\mu a \ll 1$, то $\Delta\hat{\Phi} \approx 1/a$.

Рассмотреть эту же задачу для электромагнитного поля и показать, что $\Delta\mathscr{E}_\perp \approx \Delta\mathscr{H} \approx 1/a^2$.

2. Показать, что определенная в § 11 поправка к массе δM с точностью до второго порядка дается выражением, стоящим в правой части уравнения (76).

3. Рассмотрим задачу упругого рассеяния из § 14. Будем считать мишень неполяризованной, и угол рассеяния обозначим θ: $\cos\theta = \boldsymbol{k}_i\boldsymbol{k}_f/k^2$. Показать, что во втором порядке борновского приближения и в длинноволновом пределе ($k\langle R\rangle \ll 1$) угловое распределение квантов при упругом рассеянии пропорционально $\cos^2\theta$ и сечение рассеяния стремится к нулю в пределе $k \to 0$ (это свойство характеризует скалярную связь).

4. Рассмотрим резонансное рассеяние из § 15, используя введенные там обозначения. Предположим, что момент импульса атомной системы в начальном состоянии $|\alpha\rangle$ равен нулю, а момент импульса резонансного состояния $|\lambda\rangle$ равен l. Показать, что если пренебречь вкладом $A^{(\text{пот})}$, то амплитуда пере-

[1]) Такие эффекты в классической теории по порядку величины равны ke^2/m — отношению классического радиуса электрона к длине электромагнитных волн.

хода T для процесса упругого рассеяния $\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_f$ дается формулой

$$T = \frac{\Gamma}{\omega L^3} \frac{2l+1}{k} P_l(\cos\theta) \frac{\Gamma_{\lambda\to\alpha}}{(E - E_\lambda - \delta E_\lambda) + \frac{1}{2} i\Gamma_\lambda},$$

где θ — угол рассеяния, а $\Gamma_{\lambda\to\alpha}$ — вероятности радиационного перехода $\lambda \to \alpha$ (см. ур. (82)). В качестве следствия получить формулу упругого рассеяния

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{(2l+1)^2}{k^2} P_l^2(\cos\theta) \frac{\Gamma_{\lambda\to\alpha}^2}{4(E - E_\lambda - \delta E_\lambda)^2 + \Gamma_\lambda^2}.$$

Показать, что эти выражения являются простым обобщением тех, которые были получены для резонансного рассеяния частицы на центральном потенциале (ур. (X. 64) и (X. 65)), и что приведенные в § X. 15 и X. 16 обсуждения понятий резонанса и метастабильного состояния применимы и в этом случае.

5. Пусть $A_j(\boldsymbol{r})$ и $\mathscr{E}_i(\boldsymbol{r}')$ обозначают соответственно j и i компоненты потенциала $\boldsymbol{A}$ (в радиационной калибровке) и поперечного электрического поля $\mathscr{E}_\perp$. Доказать, что выполняются коммутационные соотношения

$$[\mathscr{E}_i(\boldsymbol{r}), A_j(\boldsymbol{r}')] = 4\pi i \theta_{ij}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

где

$$\theta_{ij}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \equiv \delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') - \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j'}\left(\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}\right)$$

($\theta_{ij}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ — проектор на подпространство поперечных векторных полей).

6. Вывести для полного импульса свободного электромагнитного поля формулу (220).

7. Показать, что для внутреннего момента импульса излучения $\boldsymbol{G}^{(s)}$ справедлива формула

$$\boldsymbol{G}^{(s)} = -i \sum_{k\omega\omega'} a^\dagger_{(k\omega)} a_{(k\omega')} (\boldsymbol{\varepsilon}^{(\omega)*} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{(\omega')})$$

(обозначения § 27). В частности, если N_{k+} и N_{k-} — обозначают число право- и левополяризованных фотонов с импульсом $\boldsymbol{k}$ (см. ур. (222)), то имеем

$$\boldsymbol{G}^{(s)} = \sum_k (N_{k+} - N_{k-}) \boldsymbol{k}/k.$$

8. Доказать равенства (223) и (224).

9. 1° Пусть $u^{LM}(\boldsymbol{r})$ — скалярное поле, которое преобразуется при вращениях как сферическая функция $Y_L^M(\theta, \varphi)$, а $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ — (полярный или аксиальный) вектор, построенный из векторов $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$. Показать, что векторное поле $\boldsymbol{U}^{LM}(\boldsymbol{r})$, определяемое равенством

$$\boldsymbol{U}^{LM}(\boldsymbol{r}) \equiv \boldsymbol{V}(\boldsymbol{r}, -i\nabla) u^{LM}(\boldsymbol{r}),$$

где $\boldsymbol{V}$ — действующий на функцию u^{LM} оператор, задает состояние с моментом импульса (LM).

(В силу этого утверждения определенные в § 29 векторные поля Λ_{kjm} и $\Theta^{(\pm)}_{kjm}$ задают состояния с моментом импульса (jm)).

2° Точно так же, как 3-компонентная волновая функция частицы спина 1 образует векторное поле, $(2s+1)$-компонентная волновая функция частицы целого спина s образует неприводимое тензорное поле порядка $(2s+1)$. Пусть $X^{(s)}_{\mu}(r, p)$ есть μ-компонента неприводимого тензора порядка s, построенного из векторов $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$. Показать, что тензорное поле $\boldsymbol{U}^{LM}(r)$, μ-компонента которого определена равенством

$$U^{LM}_{\mu}(r) = X^{(s)}_{\mu}(r, -i\nabla)\, u^{LM}(r) \qquad (\mu = -s, \ldots, +s),$$

задает состояние частицы спина s с моментом импульса (LM).

10. Используя явные формулы для матричных элементов уравнений (241а, б), показать, что вероятность излучения фотона обращается в нуль, если спины начального и конечного состояний равны нулю ($0 \to 0$ правила отбора).

(*N. B.* Это свойство становится очевидным, если вместо разложения по плоским волнам использовать разложение по мультиполям).

11. Вычислить вероятность за единицу времени радиационного перехода $2p \to 1s$ в атоме водорода (ответ: $w_{2p\to 1s} = 6{,}25 \cdot 10^8\ сек^{-1}$).

12. Показать, что в длинноволновом приближении вероятность магнитно-дипольного радиационного перехода $\lambda \to \mu k\varepsilon$ (обозначения § 30) дается формулой (см. ур. (245))

$$w_{\lambda\to\mu k\varepsilon} = \frac{k}{2\pi} |\langle\lambda| [\boldsymbol{M}(\varepsilon \times k)] |\mu\rangle|^2,$$

где $\boldsymbol{M}$ — полный магнитный момент атомной системы

$$\boldsymbol{M} = \frac{e}{2m} \sum_i (\boldsymbol{l}_i + 2\boldsymbol{s}_i).$$

(*N. B.* Эта формула дает правильный ответ для вероятности радиационного перехода, если $\Delta\Pi = +1$ и $j_\lambda + j_\mu \leqslant 1$; если же $j_\lambda + j_\mu \geqslant 2$, то вклад электрического квадрупольного момента отличен от нуля, и, вообще говоря, им нельзя пренебречь).

Вывести отсюда, что вероятность полного магнитного дипольного перехода дается формулой (см. ур. (247))

$$w^{(\mathrm{tot})}_{\lambda\to\mu} = \frac{4k^3}{3(2j_\lambda + 1)} |\langle\lambda|| \boldsymbol{M} ||\mu\rangle|^2.$$

Показать, что для перехода $2s \to 1s$ в атоме водорода эта величина в нерелятивистском приближении исчезает (т. е., если использовать волновую функцию теории Шредингера).

13. Вычислить сечение фотоэлектрического эффекта на основном состоянии атома водорода. Предположим, что $me^4 \ll k \ll m$ (m — масса электрона, k — импульс налетающего фотона, $\hbar = c = 1$). Следовательно, переданная фотоэлектрону энергия достаточно велика для того, чтобы его конечное состоя-

ние можно было считать плоской волной, а его скорость достаточно мала для того, чтобы можно было рассматривать его как нерелятивистскую частицу. Поскольку магнитное взаимодействие (член $H^{(II)}$) дает пренебрежимо малый вклад, то находим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4\sqrt{2}\, e^8 \left(\frac{m}{k}\right)^{7/2} \cdot \frac{e^4}{m^2} \frac{\cos^2\varphi}{(1 - v\cos\theta)^4},$$

где φ, θ обозначают соответственно углы между направлением излучения и направлениями поляризации (линейной) и импульса налетающего фотона. Считая в этой формуле $v = 0$, получаем результат полуклассической теории (см. задачу XVII. 2).

ДОПОЛНЕНИЕ В[1])

КОЭФФИЦИЕНТЫ ВЕКТОРНОГО СЛОЖЕНИЯ И МАТРИЦЫ ВРАЩЕНИЯ

§ 1. Момент импульса. Основные обозначения и принятые соглашения

В данном приложении приняты следующие условные обозначения, относящиеся к моменту импульса.

Постоянная Планка: $\hbar = 1$.

Составляющие момента импульса: $\boldsymbol{J}$ — оператор момента импульса, имеющий декартовы компоненты J_x, J_y, J_z

$$J_\pm = J_x \pm iJ_y. \tag{1}$$

Коммутационные соотношения:

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y, \tag{2}$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm, \quad [J_+, J_-] = 2J_z. \tag{3}$$

Базисные векторы в стандартном $\{J^2 J_z\}$-представлении $|\tau JM\rangle$

$$J^2 |\tau JM\rangle = J(J+1)\,|\tau JM\rangle, \tag{4}$$

$$J_z |\tau JM\rangle = M\,|\tau JM\rangle, \tag{5}$$

$$J_\pm |\tau JM\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}\;|\tau J\, M\pm 1\rangle, \tag{6}$$

$$\langle \tau JM \,|\, \tau' J' M'\rangle = \delta_{\tau\tau'}\delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{7}$$

(J — целое или полуцелое число $\geqslant 0$, $M = -J, -J+1, \ldots, +J$). Буквой τ обозначены квантовые числа, которые следует добавить к J и M для того, чтобы получить полный набор; далее, там где это не ведет к недоразумению, индекс τ будет опущен.

Раздел I. КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША — ГОРДАНА (К. — Г.) И «3j»-СИМВОЛЫ

§ 2. Определение и основные обозначения

Пусть j_1 и j_2 — моменты импульсов квантовых систем 1 и 2 соответственно, а $\boldsymbol{J}$ — момент импульса полной системы, составленный из систем 1 и 2,

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2. \tag{8}$$

---

[1]) Это Дополнение подготовлено в сотрудничестве с Дж. Горовицем. Для более полного ознакомления с этими вопросами см. в первую очередь работу *А. Е. Эдмонс.* Угловые моменты в квантовой механике (в сб.: «Деформация атомных ядер», М., ИЛ, 1958), где приведены ссылки на основные работы. Рекомендуется также *U. Fano, G. Racah.* Irreducible tensorial sets, N. Y., Academic Press, 1959

Тензорное произведение $(2j_1+1)$ векторов системы 1

$$|j_1m_1\rangle \quad (j_1 \text{ фиксировано, } m_1 = -j_1, \ldots, +j_1)$$

с $(2j_2+1)$ векторами системы 2

$$|j_2m_2\rangle \quad (j_2 \text{ фиксировано, } m_2 = -j_2, \ldots, +j_2)$$

дает $(2j_1+1)(2j_2+1)$ собственных векторов операторов j_1^2, j_2^2, j_{1z}, j_{2z}

$$|j_1j_2m_1m_2\rangle \equiv |j_1m_1\rangle\,|j_2m_2\rangle, \tag{9}$$

из которых мы можем получить посредством унитарного преобразования $(2j_1+1)(2j_2+1)$ собственных векторов операторов j_1^2, j_2^2, J^2, J_z:

$$|j_1j_2JM\rangle \tag{10}$$
$$(J = |j_1-j_2|, \ldots, j_1+j_2;\ M = -J, \ldots, +J).$$

Определение. Коэффициенты Клебша — Гордана [1]) или коэффициенты векторного сложения

$$\langle j_1j_2m_1m_2\,|\,JM\rangle$$

являются коэффициентами унитарного преобразования

$$|j_1j_2JM\rangle = \sum_{m_1m_2} |j_1j_2m_1m_2\rangle\langle j_1j_2m_1m_2\,|\,JM\rangle. \tag{11}$$

Выбор фазового множителя [2]). Мы закончим определение векторов в (9) и (10), фиксируя их относительные фазовые множители следующим образом:

(i) векторы $|j_1m_1\rangle$, $|j_2m_2\rangle$ и $|j_1j_2JM\rangle$ удовлетворяют соотношениям (6);

(ii) $\langle j_1j_2j_1(j_1-J)\,|\,JJ\rangle$ — вещественная величина (>0);

«3j»-символы Вигнера [3]):

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \equiv \frac{(-1)^{j_1-j_2+M}}{\sqrt{2J+1}}\langle j_1j_2m_1m_2\,|\,JM\rangle. \tag{12}$$

---

[1]) Для коэффициентов Клебша — Гордана в литературе используются различные обозначения. Приведем основные:

$\langle j_1j_2m_1m_2\,|\,j_1j_2JM\rangle$ (*Е. Кондон, Т. Шортли.* Теория атомных спектров. М., ИЛ, 1949).

$C_{j_1j_2}(JM;\ m_1m_2)$ (*Дж. Блатт, В. Вайскопф.* Теоретическая ядерная физика. М., ИЛ, 1954).

$S^{j_1j_2}_{Jm_1m_2}$ (*Е. П. Вигнер.* Теория групп и ее применение в квантовой механике. М., ИЛ, 1961).

[2]) Такой выбор используется большинством автором, в частности, Вигнером, Кондоном и Шортли, Блаттом и Вайскопфом, loc. cit. и *G. Racah.* Phys. Rev. 62, 437 (1942).

[3]) Рака (см. предыдущую ссылку) использует обозначение

$$V(abc,\ \alpha\beta\gamma) \equiv (-1)^{a-b-c}\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} \equiv \frac{(-1)^{c-\gamma}}{\sqrt{2c+1}}\langle ab\alpha\beta\,|\,c\ -\gamma\rangle.$$

§ 3. Основные свойства коэффициентов К. — Г.

Вещественность:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM\rangle^* = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM\rangle.$$

Правила отбора:

(i) $m_1 + m_2 = M$;
(ii) $|j_1 - j_2| \leqslant J \leqslant j_1 + j_2$ («неравенство треугольника»).
Если эти два соотношения не выполняются, то $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM\rangle = 0$.

Симметрия: Символ $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$

(i) инвариантен при циклической перестановке столбцов;
(ii) умножается на $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ при перестановке двух столбцов;
(iii) умножается на $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ при одновременном изменении знака m_1, m_2, m_3.
Следствия:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\langle j_2 j_1 m_2 m_1 \mid JM\rangle = \tag{13а}$$

$$= (-1)^{j_1-J+m_2}\sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}}\langle J j_2 M - m_2 \mid j_1 m_1\rangle = \tag{13б}$$

$$= (-1)^{j_2-J-m_1}\sqrt{\frac{2J+1}{2j_2+1}}\langle j_1 J - m_1 M \mid j_2 m_2\rangle = \tag{13в}$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-J}\langle j_1 j_2 - m_1 - m_2 \mid J - M\rangle. \tag{13г}$$

Соотношения ортогональности:

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{+j_2}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid J'M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}, \tag{14а}$$

$$(|j_1 - j_2| \leqslant J \leqslant j_1 + j_2;\ -J \leqslant M \leqslant J)$$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{+J}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1' m_2' \mid JM\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'}, \tag{14б}$$

$$(-j_1 \leqslant m_1 \leqslant +j_1;\ -j_2 \leqslant m_2 \leqslant +j_2)$$

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{+j_2}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3+1}\delta_{j_3 j_3'}\delta_{m_3 m_3'}, \tag{15а}$$

$$\sum_{j_3=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m_3=-j_3}^{+j_3}(2j_3+1)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'}. \tag{15б}$$

Соотношение для сферических функций:

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)\, Y_{l_2}^{m_2}(\Omega)\, Y_{l_3}^{m_3}(\Omega)\, d\Omega =$$

$$= \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, \tag{16}$$

отсюда следует

$$Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)\,Y_{l_2}^{m_2}(\Omega)=\sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{M=-L}^{L}\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)}\right]^{\frac{1}{2}}\times$$
$$\times\langle l_1 l_2 00\,|\,L0\rangle\langle l_1 l_2 m_1 m_2\,|\,LM\rangle\,Y_L^M(\Omega)= \quad (17a)$$
$$=\sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{M=-L}^{L}(-1)^M\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2L+1)}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}\times$$
$$\times\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L\\ m_1 & m_2 & M\end{pmatrix}Y_L^{-M}(\Omega). \quad (17б)$$

§ 4. Методы вычисления

Рекуррентные соотношения. Приведем соотношения между коэффициентами К. — Г., аргументы которых отличаются на величины:

(i) $\Delta J=0,\ \Delta M=+1$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,\langle j_1 j_2 m_1 m_2\,|\,JM\rangle=$$
$$=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\,\langle j_1 j_2\, m_1+1\; m_2\,|\,J\;M+1\rangle+$$
$$+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\,\langle j_1 j_2\;\; m_1 m_2+1\,|\,J\,M+1\rangle. \quad (18)$$

(ii) $\Delta J=0,\ \Delta M=-1,$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\,\langle j_1 j_2 m_1 m_2\,|\,JM\rangle=$$
$$=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\,\langle j_1 j_2\, m_1-1\; m_2\,|\,J\,M-1\rangle+$$
$$+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\,\langle j_1 j_2 m_1\; m_2-1\,|\,J\,M-1\rangle. \quad (19)$$

(iii) $\Delta J=\pm 1,\ \Delta M=0,$

$$A_0\langle j_1 j_2 m_1 m_2\,|\,JM\rangle=A_+\langle j_1 j_2 m_1 m_2\,|\,J+1\,M\rangle+A_-\langle j_1 j_2 m_1 m_2\,|\,J-1M\rangle, \quad (20)$$

где

$$A_0=m_1-m_2+M\frac{j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)}{J(J+1)}\qquad(M=m_1+m_2),$$
$$A_+=f(J+1),\quad A_-=f(J),$$
$$f(x)=\sqrt{x^2-M^2}\left[\frac{[(j_1+j_2+1)^2-x^2]\,[x^2-(j_1-j_2)^2]}{4x^2(2x-1)(2x+1)}\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Формула Рака:

$$\begin{pmatrix} a & b & c\\ \alpha & \beta & \gamma\end{pmatrix}=(-1)^{a-b-\gamma}\sqrt{\Delta(abc)}\times$$
$$\times\sqrt{(a+\alpha)!\,(a-\alpha)!\,(b+\beta)!\,(b-\beta)!\,(c+\gamma)!\,(c-\gamma)!}\times$$
$$\times\sum_t(-1)^t\,[t!\,(c-b+t+\alpha)!\,(c-a+t-\beta)!\,(a+b-c-t)!\times$$
$$\times(a-t-\alpha)!\,(b-t+\beta)!]^{-1} \quad (21)$$
$$(\alpha+\beta+\gamma=0,\ |a-b|\leqslant c\leqslant a+b),$$

где

$$\Delta(abc)\equiv\frac{(a+b-c)!\,(b+c-a)!\,(c+a-b)!}{(a+b+c+1)!}. \quad (22)$$

Суммирование происходит по всем целым значениям t, для которых факториалы имеют смысл, т. е. для которых аргументы факториалов положительны или равны нулю ($0! = 1$). Число членов в этой сумме равно $\nu + 1$, где ν — наименьшее из девяти чисел:

$$a \pm \alpha, \qquad b \pm \beta, \qquad c \pm \gamma,$$
$$a + b - c, \quad b + c - a, \quad c + a - b.$$

§ 5. Специальные значения и таблицы

Специальные значения

(i) Если J и M принимают наибольшее значение, то

$$\langle j_1 j_2 j_1 j_2 \mid j_1 + j_2 \;\; j_1 + j_2 \rangle = 1.$$

(ii) Если одно из j равно нулю, то

$$\langle j0m0 \mid jm \rangle = 1 \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$$

(iii) $m_1 = m_2 = m_3 = 0$:

если $l_1 + l_2 + l_3$ нечетно, то

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0, \tag{23а}$$

если $2p = l_1 + l_2 + l_3$ четно, то

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^p \sqrt{\Delta(l_1 l_2 l_3)}\, \frac{p!}{(p-l_1)!\,(p-l_2)!\,(p-l_3)!} \tag{23б}$$

(l_1, l_2, l_3 — целые числа $\geqslant 0$, удовлетворяющие неравенствам треугольника).

Специальные случаи формулы Рака. Следующие формулы, а также те, которые получаются при использовании соотношений симметрии, дают коэффициенты К. — Г. в специальных случаях:

(i) $m_1 = \pm j_1$, или $m_2 = \pm j_2$, или $M = \pm J$:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JJ \rangle = \langle j_2 j_1 \; -m_2 \; -m_1 \mid J \; -J \rangle =$$
$$= (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{(2J+1)!\,(j_2 + j_2 - J)!}{(j_1 + j_2 + J + 1)!\,(J + j_1 - j_2)!\,(J + j_2 - j_1)!}} \times$$
$$\times \sqrt{\frac{(j_1 + m_1)!\,(j_2 + m_2)!}{(j_1 - m_1)!\,(j_2 - m_2)!}} \quad (m_1 + m_2 = J). \tag{24}$$

(ii) одно из j есть сумма двух других:

если $J = j_1 + j_2$, то

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM \rangle =$$
$$= \sqrt{\frac{(2j_1)!\,(2j_2)!}{(2J)!}} \sqrt{\frac{(J+M)!\,(J-M)!}{(j_1 + m_1)!\,(j_1 - m_1)!\,(j_2 + m_2)!\,(j_2 - m_2)!}}, \tag{25}$$

$$\langle J j_2 M \; -m_2 \mid j_1 m_1 \rangle = (-1)^{j_2 - m_2} \sqrt{\frac{2j_1 + 1}{2J + 1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM \rangle. \tag{26}$$

Таблицы «3j»-символов. Таблицы I—IV дают выражения для символа

$$\begin{pmatrix} j & s & (j+e) \\ m & \mu & (-m-\mu) \end{pmatrix}$$

как функции j и m для значений $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$; $0 \leqslant e \leqslant s$; $0 \leqslant \mu \leqslant s$.

Таблица I

Таблица Φ^0_{00} и $\Phi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$

$s=0$	$\Phi^0_{00}=1$
$s=\frac{1}{2}$	$\Phi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=1$

Таблица II

Таблица $\Phi^1_{\mu e}$.

$s=1$	$e=0$	$e=1$
$\mu=0$	$-2m$	$-\sqrt{2(j-m+1)}$
$\mu=1$	$-\sqrt{2(j-m)}$	1

Таблица III

Таблица $\Phi^{\frac{3}{2}}_{\mu e}$

$s=\frac{3}{2}$	$e=\frac{1}{2}$	$e=\frac{3}{2}$
$\mu=\frac{1}{2}$	$j-3m$	$-\sqrt{3(j-m+1)}$
$\mu=\frac{3}{2}$	$-\sqrt{3(j-m)}$	1

Таблица IV

Таблица $\Phi^2_{\mu e}$

$s=2$	$e=0$	$e=1$	$e=2$
$\mu=0$	$2[3m^2-j(j+1)]$	$2m\sqrt{6(j-m+1)}$	$\sqrt{6(j-m+2)(j-m+1)}$
$\mu=1$	$(2m+1)\sqrt{6(j-m)}$	$2(j-2m)$	$-2\sqrt{j-m+1}$
$\mu=2$	$\sqrt{6(j-m)(j-m-1)}$	$-2\sqrt{(j-m)}$	1

Используя эти выражения, а также соотношения симметрии, мы можем просто вычислить любые из коэффициентов К. — Г., для которых одно из j равно $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ или 2.

В таблицах приведены значения функций $\Phi^s_{\mu e}(jm)$, которые определяются посредством соотношений

$$\begin{pmatrix} j & s & (j+e) \\ m & \mu & (-m-\mu) \end{pmatrix} = (-1)^{j+m} \sqrt{\frac{(2j+e-s)!}{(2j+e+s+1)!} \frac{(j+m+\mu+e)!}{(j+m)!}}\, \Phi^s_{\mu e}. \tag{27}$$

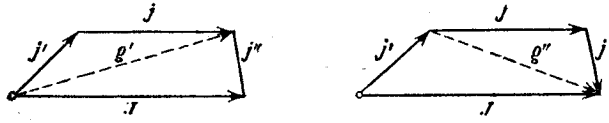
Раздел II. КОЭФФИЦИЕНТЫ РАКА И «6j»-СИМВОЛЫ

§ 6. Определение и основные обозначения

Сложение трех моментов импульса. Пусть J — полный момент импульса системы, которая состоит из трех отдельных частей, обладающих моментами j, j', j'' соответственно:

$$J = j + j' + j''.$$

В $(2j+1)(2j'+1)(2j''+1)$-мерном пространстве, натянутом на векторы $|mm'm''\rangle \equiv |jm\rangle\,|j'm'\rangle\,|j''m''\rangle$ (j, j', j'' — заданы; m, m', m'' — переменные), подпространство момента (JM) обычно имеет размерность, большую единицы ($2J$ и $2M$ — целые числа, четные или нечетные в зависимости от числа $2(j+j'+j'')$; $\min|j \pm j' \pm j''| \leqslant J \leqslant j+j'+j''$; $-J \leqslant M \leqslant +J$).



а) $j'+j=g'$, $g'+j''=J$ б) $j+j''=g''$, $j'+g''=J$

Рис. 28. $J = j + j' + j''$. Различные схемы сложения.

Следующие две схемы сложения дают конструкцию двух, вообще говоря, различных систем базисных векторов из этого подпространства[1]):

а) $j' + j = g'$, $g' + j'' = J$ (рис. 28, *а*) — векторы $|(j'j)\,g',\ j'';\ JM\rangle$

$$|(j'j)\,g',\ j'';\ JM\rangle = \sum_{\substack{mm'm'' \\ \mu'}} |mm'm''\rangle\langle j'jm'm\,|\,g'\mu'\rangle\langle g'j''\mu'm''\,|JM\rangle.$$

б) $j + j'' = g''$, $j' + g'' = J$ (рис. 28, *б*) — векторы $|j',\ (jj'')\,g'';\ JM\rangle$

$$|j',\ (jj'')\,g'';\ JM\rangle = \sum_{\substack{mm'm'' \\ \mu''}} |mm'm''\rangle\langle jj''mm''\,|\,g''\mu''\rangle\langle j'g''m'\mu''\,|\,JM\rangle.$$

Можно перейти от одной системы к другой с помощью некоторого унитарного преобразования.

Определение «6j»-символов Вигнера $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}$.

---

[1]) Здесь важен порядок, в котором складываются различные векторы. При изменении порядка, например, векторов j и j'' при сложении по схеме (а) изменяется знак результирующего вектора.

Эти символы связаны с коэффициентами упомянутого унитарного преобразования посредством соотношений

$$\langle j', (jj'')\, g''; \; JM \,|\, (j'j)\, g', j''; \; J'M' \rangle =$$
$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \sqrt{(2g'+1)(2g''+1)}\,(-1)^{j+j'+j''+J} \begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}, \qquad (28)$$

$$|\,(j'j)\, g', j''; \; JM\rangle = \sum_{g''} |\, j', (jj'')\, g''; \; JM\rangle \times$$
$$\times \sqrt{(2g'+1)(2g''+1)}\,(-1)^{j+j'+j''+J} \begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}, \qquad (29)$$

W-коэффициенты Рака[1]). Рака использовал коэффициенты W, которые совпадают с «6*j*»-символами с точностью до знака:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+J_1+J_2} W\,(j_1 j_2 J_2 J_1;\; j_3 J_3). \qquad (30)$$

Присоединенные коэффициенты. В выражениях для угловых распределений иногда встречаются коэффициенты $Z(LJL'J';\, j\lambda)$ и $F_\lambda(LL'J_1J_2)$, для которых имеются подробные таблицы и которые определяются соотношениями:

$$Z(LJL'J';\, j\lambda) = (-1)^{J+J'+\frac{1}{2}(L'-L+\lambda)} \times$$
$$\times \sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J+1)(2J'+1)(2\lambda+1)} \begin{pmatrix} L & L' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L & L' & \lambda \\ J' & J & j \end{Bmatrix}. \qquad (31а)$$

$$F_\lambda(LL'J_1J_2) = (-1)^{J_1+J_2-1} \times$$
$$\times \sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J_2+1)(2\lambda+1)} \begin{pmatrix} L & L' & \lambda \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L & L' & \lambda \\ J_2 & J_2 & J_1 \end{Bmatrix}. \qquad (31б)$$

Коэффициенты $F_\lambda(LL'J_1J_2)$ используются главным образом в тех случаях, когда в результате реакции появляются частицы со спином 1 и не регистрируется поляризация.

Присоединенный тетраэдр для «6*j*»-символов. Чтобы избежать путаницы при обращении с W-коэффициентами и «6*j*»-символами, удобно связать с каждым символом $\begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}$ некоторый тетраэдр, каждое ребро которого представляет один из шести моментов импульса, входящих в этот символ (рис. 29). В этом представлении каждая пара противолежащих ребер ассоциируется с двумя моментами данного столбца, а три момента первой строки соответствуют ребрам одной из граней тетраэдра. Кроме того, каждая грань соответствует трем моментам импульса, один из которых получен с помощью векторного сложения двух других, как это следует из определения «6*j*»-символов.

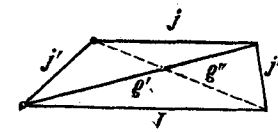


Рис. 29. Тетраэдр, ассоциированный с символом $\begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}$.

[1]) *Racah*, loc. cit. Знаковый множитель исчезает из двух предыдущих соотношений при подстановке W вместо «6*j*»-символов. Однако «6*j*»-символы имеют более простые соотношения симметрии (см. § 7).

§ 7. Основные свойства «6j»-символов

Вещественность. Все «6j»-символы вещественны.

Правила отбора. Для того чтобы

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} \neq 0,$$

три момента импульса, составляющие каждую грань тетраэдра, должны быть таковы, чтобы каждой из них был векторной суммой двух других. Иными словами, необходимо, чтобы элементы каждой тройки

$$(j_1 j_2 j_3),\ (j_1 J_2 J_3),\ (J_1 j_2 J_3),\ (J_1 J_2 j_3):$$

(i) удовлетворяли неравенствам треугольника;
(ii) имели целочисленную сумму

(*N. B.* Отметим, что каждое из шести j — целое, или три j одной и той же грани — целые, или же два j, соответствующие противоположным ребрам, — целые числа.)

Соотношение симметрии. «6j»-символы инвариантны:
(i) относительно перестановки столбцов, т. е.

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ J_2 & J_1 & J_3 \end{Bmatrix};$$

(ii) относительно перестановки двух элементов первой строки с двумя соответствующими элементами второй строки, т. е.

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & J_3 \end{Bmatrix}.$$

Иначе говоря, для задания «6j»-символа достаточно задать шесть моментов импульса и их относительное расположение на присоединенном тетраэдре.

Основные соотношения между «6j»-символами и коэффициентами К. — Г. Следующие соотношения связывают символ $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}$ с коэффициентами К. — Г., которые составлены из троек $(j_1 j_2 j_3)$, $(j_1 J_2 J_3)$, $(J_1 j_2 J_3)$, $(J_1 J_2 j_3)$, соответствующих четырем граням присоединенного тетраэдра:

$$\sum_{\substack{M_1 M_2 M_3 \\ m_1 m_2}} (-1)^{J_1+J_2+J_3+M_1+M_2+M_3} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} =$$

$$= \delta_{j_3 j_3'} \delta_{m_3 m_3'} \frac{1}{2j_3+1} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}. \qquad (32)$$

(*N. B.* Фактически суммирование сводится к суммированию по двум индексам, поскольку M и m связаны.)

$$\sum_{M_1 M_2 M_3} (-1)^{J_1+J_2+J_3+M_1+M_2+M_3} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}. \qquad (33)$$

(*N.B.* Здесь индекс суммирования только один.)

$$\sum_{M_3}(-1)^{j_2+J_2-m_1-M_1}\begin{pmatrix} j_1 & J_2 & J_3\\ m_1 & M_2 & -M_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_3 & j_2 & J_1\\ M_3 & m_2 & -M_1\end{pmatrix}=$$

$$=\sum_{j_3 m_3}(2j_3+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ J_1 & J_2 & J_3\end{Bmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & -m_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_3 & J_2 & J_1\\ m_3 & M_2 & -M_1\end{pmatrix}. \quad (34)$$

(*N.B.* Суммы по M_3 и m_3 имеют всего лишь одно слагаемое.)

Соотношения Рака—Эллиота и соотношение ортогональности:

$$\sum_x(-1)^{2x}(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x\\ a & b & f\end{Bmatrix}=1, \quad (35а)$$

$$\sum_x(-1)^{a+b+x}(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x\\ b & a & f\end{Bmatrix}=\delta_{fi}\sqrt{(2a+1)(2b+1)}, \quad (35б)$$

$$\sum_x(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x\\ c & d & f\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} c & d & x\\ a & b & g\end{Bmatrix}=\delta_{fg}\frac{1}{2f+1}, \quad (35в)$$

$$\sum_x(-1)^{f+g+x}(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x\\ c & d & f\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} c & d & x\\ b & a & g\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} a & d & f\\ b & c & g\end{Bmatrix}, \quad (35г)$$

$$\sum_x(-1)^{a+b+c+d+e+f+g+h+x+l}(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x\\ c & d & g\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} c & d & x\\ e & f & h\end{Bmatrix}\times$$

$$\times\begin{Bmatrix} e & f & x\\ b & a & j\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} g & h & j\\ e & a & d\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} g & h & j\\ f & b & c\end{Bmatrix}. \quad (35д)$$

§ 8. Формула Рака, таблицы

Формула Рака:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ J_1 & J_2 & J_3\end{Bmatrix}=[\Delta(j_1j_2j_3)\,\Delta(j_1J_2J_3)\,\Delta(J_1j_2J_3)\,\Delta(J_1J_2j_3)]^{\frac{1}{2}}\times$$

$$\times\sum_t\frac{(-1)^t(t+1)!}{A(t, j_1, j_2, j_3, J_1, J_2, J_3)}, \quad (36)$$

где

$$A(t, j_1, \ldots, J_3)=(t-j_1-j_2-j_3)!\;(t-j_1-J_2-J_3)!\times$$

$$\times(t-J_1-j_2-J_3)!\;(t-J_1-J_2-j_3)!\;(j_1+j_2+J_1+J_2-t)!\times$$

$$\times(j_2+j_3+J_2+J_3-t)!\;(j_3+j_1+J_3+J_1-t)!$$

Определение $\Delta(abc)$ и соглашение о суммировании то же самое, что и в формуле (22). Число слагаемых в $\sum_t$ равно $1+\sigma$, где σ — наименьшее из двенадцати чисел:

$$j_1+j_2-j_3,\quad j_1+J_2-J_3,\quad J_1+j_2-J_3,\quad J_1+J_2-j_3,$$
$$j_2+j_3-j_1,\quad J_2+J_3-j_1,\quad j_2+J_3-J_1,\quad J_2+j_3-J_1,$$
$$j_3+j_1-j_2,\quad J_3+j_1-J_2,\quad J_3+J_1-j_2,\quad j_3+J_1-J_2.$$

Специальные случаи:

(i) одно из j равно нулю

$$\begin{Bmatrix} j & j' & 0 \\ J & J' & g \end{Bmatrix} = (-1)^{j+J+g} \frac{\delta_{jj'}\delta_{JJ'}}{\sqrt{(2j+1)(2J+1)}} \quad (|j-J| \leqslant g \leqslant j+J); \tag{37}$$

(ii) одно из j равно $\frac{1}{2}$

$$\begin{Bmatrix} j & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & J+\frac{1}{2} & g+\frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^{1+g+j+J} \left[\frac{(1+g+j-J)(1+g-j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{38}$$

$$(|j-J| \leqslant g \leqslant j+J);$$

$$\begin{Bmatrix} J & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J+\frac{1}{2} & J & g \end{Bmatrix} = (-1)^{1+g+j+J} \left[\frac{(1-g+j+J)(2+g+j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{39}$$

$$(|j-J| \leqslant g \leqslant j+J).$$

Раздел III. **«9j»-СИМВОЛЫ**

§ 9. Определение и основные свойства

Сложение четырех моментов импульса и определение «9j»-символа. Пусть полный момент импульса $\boldsymbol{J}$ относится к системе, составленной из четырех отдельных систем, моменты которых соответственно равны j_1, j_2, j_3, j_4:

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 + \boldsymbol{j}_3 + \boldsymbol{j}_4.$$

В $\prod_{i=1}^{4}(2j_i+1)$-мерном пространстве, натянутом на векторы

$$|m_1 m_2 m_3 m_4\rangle \equiv \prod_{i=1}^{4} |j_i m_i\rangle \quad (j_i - \text{const}, \ m_i \text{ меняются}),$$

следующие две схемы сложения ведут к двум различным системам базисных векторов подпространства с моментом импульса (JM):

а) $\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 = \boldsymbol{J}_{12}, \quad \boldsymbol{j}_3 + \boldsymbol{j}_4 = \boldsymbol{J}_{34}, \quad \boldsymbol{J}_{12} + \boldsymbol{J}_{34} = \boldsymbol{J},$
векторы $|(j_1 j_2) J_{12}, (j_3 j_4) J_{34}; JM\rangle$;

б) $\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_3 = \boldsymbol{J}_{13}, \quad \boldsymbol{j}_2 + \boldsymbol{j}_4 = \boldsymbol{J}_{24}, \quad \boldsymbol{J}_{13} + \boldsymbol{J}_{24} = \boldsymbol{J},$
векторы $|(j_1 j_3) J_{13}, (j_2 j_4) J_{24}; JM\rangle$.

«9j»-символы Вигнера при этом определяются как коэффициенты унитарного преобразования от одного базиса к другому:

$$\langle (j_1 j_2) J_{12},\ (j_3 j_4) J_{34};\ JM \mid (j_1 j_3) J_{13},\ (j_2 j_4) J_{24};\ J'M' \rangle =$$
$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)} \times$$
$$\times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}. \qquad (40а)$$

Можно также определить «9j»-символы следующим образом:

$$\langle [(j_1 j_2) J_{12},\ j_3] J_{123} j_4;\ JM \mid [(j_4 j_2) J_{42},\ j_3] J_{423} j_1;\ J'M' \rangle =$$
$$= (-1)^{J_{423}+j_1-J_{123}-j_4}\delta_{JJ'}\delta_{MM'} \times$$
$$\times \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{123}+1)(2J_{42}+1)(2J_{423}+1)} \begin{Bmatrix} j_2 & J_{12} & j_1 \\ J_{42} & j_3 & J_{423} \\ j_4 & J_{123} & J \end{Bmatrix}. \qquad (40б)$$

Используется также обозначение

$$X \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}.$$

Связь «9j»-символов с «3j»-символами:

$$\begin{pmatrix} J_{13} & J_{24} & J \\ M_{13} & M_{24} & M \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 m_4 \\ M_{12} M_{34}}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & M_{12} \end{pmatrix} \times$$
$$\times \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ m_3 & m_4 & M_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & J_{13} \\ m_1 & m_3 & M_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & J_{24} \\ m_2 & m_4 & M_{24} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{12} & J_{34} & J \\ M_{12} & M_{34} & M \end{pmatrix}. \qquad (40в)$$

Соотношения симметрии. Символ

$$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \\ J_7 & J_8 & J_9 \end{Bmatrix}$$

(i) при перестановке двух строк или двух столбцов умножается на $(-1)^R$, где $R = \sum_{i=1}^{9} J_i$;

(ii) инвариантен при зеркальных отражениях относительно диагоналей.

Соотношение ортогональности:

$$\sum_{J_{13} J_{24}} (2J_{13}+1)(2J_{24}+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J'_{12} \\ j_3 & j_4 & J'_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = \frac{\delta_{J_{12}J'_{12}}\delta_{J_{34}J'_{34}}}{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)}.$$

Выражение «9j»-символов через «6j»-символы:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = \sum_g (-1)^{2g} (2g+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ J_{34} & J & g \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ j_2 & g & J_{24} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_{13} & J_{24} & J \\ g & j_1 & j_3 \end{Bmatrix}. \qquad (41)$$

Случай, когда одно из j равно нулю:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_3 & j_4 & j' \\ g & g' & 0 \end{Bmatrix} = \delta_{jj'}\delta_{gg'} \frac{(-1)^{j_2+j_3+j+g}}{\sqrt{(2j+1)(2g+1)}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_4 & j_3 & g \end{Bmatrix}. \tag{42}$$

Раздел IV. МАТРИЦЫ ВРАЩЕНИЯ

§ 10. Вращения. Операторы вращения. $R^{(J)}$-матрицы

$$\begin{aligned} &\mathcal{R}_u(\varphi) \text{ — вращение на угол } \varphi \text{ вокруг оси } \boldsymbol{u}, \\ &\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) \text{ — вращение на углы Эйлера } (\alpha, \beta, \gamma), \\ &\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}_Z(\gamma)\,\mathcal{R}_u(\beta)\,\mathcal{R}_z(\alpha). \end{aligned} \tag{43}$$

Операции, написанные в правой части равенства, выполняются в порядке справа налево (см. рис. 30).

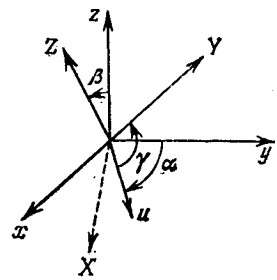


Рис. 30. Углы Эйлера $\alpha = (Oy, Ou)$, $\beta = (Oz, OZ)$, $\gamma = (Ou, OY)$.

Присоединенная матрица: матрица преобразования координат векторов (обозначена той же буквой $\mathcal{R}$, что и само вращение).

Если $\boldsymbol{V}(V_1, V_2, V_3)$ — некоторый вектор, а $\boldsymbol{V}'(V_1', V_2', V_3')$ — его преобразование при вращении $\mathcal{R}$, то имеем:

$V_i' = \mathcal{R}_{ij}V_j$, $\mathcal{R}_{ij}$ — элементы присоединенной матрицы.

(Следствие. Если $\boldsymbol{A}_j$ есть преобразование единичного вектора $\boldsymbol{a}_j$ вдоль j-й оси ($j = 1, 2, 3$), то получим:

$$\boldsymbol{A}_j \equiv \mathcal{R}[\boldsymbol{a}_j] = \boldsymbol{a}_i\mathcal{R}_{ij}.\ \mathcal{R}_{ij} = (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{A}_j).)$$

$$\mathcal{R}^* = \mathcal{R},\ \tilde{\mathcal{R}} = \mathcal{R}^{-1},\ \det\mathcal{R} = 1. \tag{44}$$

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) \equiv$$

$$\equiv \begin{pmatrix} \cos\gamma\cos\beta\cos\alpha - \sin\gamma\sin\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\cos\alpha - \cos\gamma\sin\alpha & \sin\beta\cos\alpha \\ \cos\gamma\cos\beta\sin\alpha + \sin\gamma\cos\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\sin\alpha + \cos\gamma\cos\alpha & \sin\beta\sin\alpha \\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\gamma\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}. \tag{45}$$

Оператор вращения. Унитарный оператор R, примененный к вектору $|\rangle$, задает его преобразование при вращении $\mathcal{R}$

$$\mathcal{R}[|\rangle] \equiv R|\rangle,\quad R^\dagger R = RR^\dagger = 1. \tag{46}$$

Если Q — наблюдаемая квантовой системы, то

$$\mathscr{R}[Q] \equiv RQR^{-1}. \tag{47}$$

Если $\boldsymbol{B} \equiv (B_x, B_y, B_z)$ есть векторный оператор, то $(B_i \equiv \boldsymbol{B}a_i)$

$$\mathscr{R}[B_i] \equiv RB_iR^{-1} \equiv (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{A}_i) = \widetilde{\mathscr{R}}_{ij}B_j. \tag{48}$$

(*N. B.* Здесь фигурирует преобразование, обратное к $\mathscr{R}$, а не само $\mathscr{R}$.)

Применение (48) к преобразованию компонент момента импульса $\boldsymbol{J}$ при вращении $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ дает

$$RJ_\pm R^{-1} = e^{\mp i\gamma}\left[\frac{1+\cos\beta}{2}\, e^{\mp i\alpha}J_\pm - \frac{1-\cos\beta}{2}\, e^{\pm i\alpha}J_\mp - \sin\beta J_z\right], \tag{49а}$$

$$RJ_zR^{-1} = \frac{1}{2}\sin\beta\left(e^{-i\alpha}J_+ + e^{i\alpha}J_-\right) + \cos\beta J_z. \tag{49б}$$

Выражение через составляющие полного момента импульса $\boldsymbol{J}$. Бесконечно малое вращение:

$$R_u(\varepsilon) = 1 - i\varepsilon(\boldsymbol{J}\ \boldsymbol{u}) \qquad (\varepsilon \ll 1). \tag{50}$$

Конечные вращения:

$$R_u(\varphi) = e^{-i\varphi(J,\ u)}, \tag{51}$$

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z}. \tag{52}$$

Соответствие между вращениями и операторами вращения. Взаимнооднозначное соответствие, существующее между бесконечно малыми вращениями и операторами R, близкими к 1, может не иметь места в случае конечных вращений.

В общем случае любому конечному вращению $\mathscr{R}$ соответствуют два оператора R' и R'', удовлетворяющие уравнению

$$R'' = DR',$$

где оператор D определяется так:

$$D = \begin{cases} +1, & \text{если } J \text{ — целое,} \\ -1, & \text{если } J \text{ — полуцелое.} \end{cases}$$

Для равенства $R' = R''$ необходимо, чтобы пространство векторов состояния было образовано векторами, отвечающими только целым значениям J.

$$R_u(2\pi) = D, \quad R_u(4\pi) = 1.$$

Пусть $(\alpha\beta\gamma)$ и $(\alpha_1\beta_1\gamma_1)$ — два набора углов Эйлера, определяющих одно и то же вращение (уравнение (XIII. 42)). Тогда

$$R(\alpha_1\beta_1\gamma_1) = D^{n_\alpha+n_\beta+n_\gamma}R(\alpha\beta\gamma). \tag{53}$$

Матрицы вращений $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$. Это матрицы порядка $(2J+1)$ с элементами

$$R^{(J)}_{MM'} = \langle JM \mid R(\alpha\beta\gamma) \mid JM'\rangle = \langle JM \mid e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z} \mid JM'\rangle. \tag{54}$$

Векторы $|JM\rangle$ (J фиксировано, $M = -J, \ldots, +J$) есть собственные векторы операторов $\boldsymbol{J}^2$ и J_z, которые связаны друг с другом соотношениями (6).

Матрица $r^{(J)}(\beta)$:

$$r^{(J)}(\beta) \equiv R^{(J)}(0, \beta, 0),$$

$$r^{(J)}_{MM'}(\beta) \equiv \langle JM | e^{-i\beta J_y} | JM' \rangle, \tag{55}$$

$$R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha M} r^{(J)}_{MM'}(\beta) e^{-i\gamma M'}. \tag{56}$$

§ 11. Основные свойства матриц $R^{(J)}$

Обратная матрица:

$$[R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)]^{-1} = R^{(J)}(-\gamma, -\beta, -\alpha). \tag{57}$$

Определитель:

$$\det R^{(J)} = 1. \tag{58}$$

Вращение на 2π:

$$R^{(J)}_{u}(2\pi) = (-1)^{2J}. \tag{59}$$

Каждому набору углов Эйлера соответствует единственная матрица $R^{(J)}$. Каждому вращению $\mathcal{R}$ соответствует единственная матрица $R^{(J)}$, если J — целое, и две матрицы, отличающиеся знаком, если J — полуцелое.

Вещественность: $r^{(J)}(\beta)$ — вещественная матрица.

Вращения на угол π вокруг координатных осей. Обозначения: X, Y, Z — операторы вращения на угол $+\pi$ вокруг осей Ox, Oy, Oz соответственно:

$$X^2 = Y^2 = Z^2 = XYZ = (-1)^{2J}. \tag{60}$$

$$X | JM\rangle = e^{-i\pi J} | J - M\rangle, \quad X^{(J)}_{MM'} = e^{-i\pi J}\delta_{M\,-M'}. \tag{61}$$

$$Y | JM\rangle = (-1)^{J-M} | J - M\rangle, \quad Y^{(J)}_{MM'} = (-1)^{J+M}\delta_{M\,-M'}. \tag{62}$$

$$Z | JM\rangle = e^{-i\pi M} | JM\rangle, \quad Z^{(J)}_{MM'} = e^{-i\pi M}\delta_{MM'}. \tag{63}$$

Преобразование оператора момента при вращении Y:

$$YJ_xY^{\dagger} = -J_x, \quad YJ_yY^{\dagger} = J_y, \quad YJ_zY^{\dagger} = -J_z, \quad YJ_{\pm}Y^{\dagger} = -J_{\mp}.$$

Следовательно,

$$YR^{(J)}Y^{\dagger} = R^{(J)*}. \tag{64}$$

Соотношения симметрии, следующие из (62) и (64):

$$r^{(J)}_{MM'} = (-1)^{M-M'} r^{(J)}_{-M\,-M'}. \tag{65}$$

$$R^{(J)*}_{MM'} = (-1)^{M-M'} R^{(J)}_{-M\,-M'}. \tag{66}$$

Унитарность и соотношения ортогональности: $R^{(J)-1} = R^{(J)\dagger}$, отсюда получаем соотношения унитарности

$$\sum_M R^{(J)}_{MM'} R^{(J)*}_{MM''} = \delta_{M'M''}, \quad \sum_M R^{(J)}_{M'M} R^{(J)*}_{M''M} = \delta_{M'M''}. \tag{67}$$

Используя соотношения симметрии, получаем соотношения ортогональности

$$\sum_M (-1)^{J+M} R^{(J)}_{MM'} R^{(J)}_{-M\,-M''} = (-1)^{J+M'} \delta_{M'M''},$$
$$\sum_M (-1)^{J+M} R^{(J)}_{M'M} R^{(J)}_{-M''\,-M} = (-1)^{J+M'} \delta_{M'M''}. \tag{68}$$

Формулы композиции и редукции. В следующих формулах матрицы $R^{(j_1)}$, $R^{(j_2)}$, $R^{(J)}$ относятся к одним и тем же углам Эйлера.

Разложение тензорного произведения $R^{(j_1)} \otimes R^{(j_2)}$

$$R^{(j_1)}_{m_1 m_1'} R^{(j_2)}_{m_2 m_2'} = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M, M'=-J}^{+J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle R^{(J)}_{MM'} \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM'\rangle. \tag{69}$$

Формула композиции:

$$R^{(J)}_{MM'} = \sum_{m_1, m_1'=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2, m_2'=-j_2}^{+j_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle R^{(j_1)}_{m_1 m_1'} R^{(j_2)}_{m_2 m_2'} \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM'\rangle. \tag{70}$$

В частности, если $J = j_1 + j_2$, то

$$R^{(J)}_{JJ} = R^{(j_1)}_{j_1 j_1} R^{(j_2)}_{j_2 j_2}, \quad R^{(j_1+j_2)}_{j_1+j_2\;\,j} = R^{(j_1)}_{j_1\,-j_1} R^{(j_2)}_{j_2\,-j_2}. \tag{71}$$

§ 12. Вычисление матричных элементов $R^{(J)}_{MM'}$

Основные методы вычисления. Если матрица $r^{(J)}(\beta)$ известна, то матрицу $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$ легко получить из соотношения (56). Матрица $r^{(J)}$ вещественная, унитарная, обладает свойством симметрии (65)

$$r^{(J)}_{MM'}(\beta) = r^{(J)}_{M'M}(-\beta) = (-1)^{M-M'} r^{(J)}_{-M\,-M'}(\beta).$$

Поэтому нужно только знать матричные элементы, соответствующие $M \geqslant 0$ и $M \geqslant M'$, чтобы получить все остальные. Для этого мы можем:

а) вычислить их непосредственно с помощью приводимой ниже формулы Вигнера;

б) получить их с помощью формулы (70) для композиции $r^{(j_1)}$ $r^{(j_2)}$ с меньшими значениями момента импульса; в частности, все матрицы $r^{(J)}$ могут быть получены одна из другой, начиная с $r^{(1/2)}$;

в) получить их друг из друга, используя рекуррентные соотношения, вытекающие из уравнений (49).

Формула Вигнера. Введем обозначения

$$\xi \equiv \cos\frac{1}{2}\beta, \quad \eta \equiv \sin\frac{1}{2}\beta.$$

Получаем

$$r^{(J)}_{MM'} = \sum_t (-1)^t \frac{\sqrt{(J+M)!\,(J-M)!\,(J+M')!\,(J-M')!}}{(J+M-t)!\,(J-M'-t)!\,t!\,(t-M+M')!} \times$$
$$\times \xi^{2J+M-M'-2t} \eta^{2t-M+M'}. \tag{72}$$

В данном случае при суммировании используется то же соглашение, что и в формуле (21). Число членов в $\sum_t$ равно $1+\tau$, где τ — наименьшее из четы-

рех чисел $J \pm M$, $J \pm M'$. По отношению к переменным ξ и η выражение $r^{(J)}_{MM'}$ есть однородный полином степени $2J$.

Частные случаи формулы Вигнера:

$$r^{(J)}_{MJ} = (-1)^{J-M} r^{(J)}_{JM} = r^{(J)}_{-J\,-M} = (-1)^{J-M} r^{(J)}_{-M\,-J} = \\ = \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!\,(J-M)!}}\, \xi^{J+M} \eta^{J-M}, \qquad (73)$$

$$r^{(J)}_{JJ} = r^{(J)}_{-J\,-J} = \xi^{2J}, \quad r^{(J)}_{J\,-J} = (-1)^{2J} r^{(J)}_{-J\,J} = \eta^{2J}.$$

Случай $J = 1/2$:

$$R^{\left(\frac{1}{2}\right)}(\alpha\beta\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos\frac{1}{2}\beta\, e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin\frac{1}{2}\beta\, e^{+\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{+\frac{1}{2}i\alpha} \sin\frac{1}{2}\beta\, e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{+\frac{1}{2}i\alpha} \cos\frac{1}{2}\beta\, e^{+\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix} \qquad (74)$$

(в этом выражении верхняя и нижняя строки соответствуют $M = \frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$, этим же значениям соответствуют левый и правый столбцы).

§ 13. Целые значения J ($J = l$) и преобразование сферических функций при вращениях

Случай $l = 1$

$$r^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\beta) & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta) \\ \frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta) \end{pmatrix}. \qquad (75)$$

(В этом выражении расположенные сверху вниз строки соответствуют $M = +1, 0, -1$; расположенные слева направо столбцы соответствуют тем же значениям M.)

Преобразование сферических функций при вращении. Пусть $\omega \equiv (\theta, \varphi)$ — сферические координаты единичного вектора v относительно координатной системы $Oxyz$

$$(v_1 = \sin\theta\cos\varphi,\ v_2 = \sin\theta\sin\varphi,\ v_3 = \cos\theta).$$

$\Omega \equiv (\Theta, \Phi)$ — сферические координаты того же вектора v относительно системы $OXYZ$.

$(\alpha\beta\gamma)$ — углы Эйлера вращения, переводящего систему $Oxyz$ в систему $OXYZ$ [1]).

---

[1]) Для устранения произвола в выборе углов Эйлера мы потребуем выполнения дополнительных соотношений

$$0 \leqslant \alpha \leqslant 2\pi, \quad 0 \leqslant \beta \leqslant \pi, \quad -\pi \leqslant \gamma \leqslant +\pi.$$

(При таком выборе система $OuzZ$ является правой.) Тогда:

(i) сферические координаты оси OZ в системе $Oxyz$ есть (β, α);

(ii) сферические координаты оси Oz в системе $OXYZ$ — $(\beta, \pi - \gamma)$.

Θ и Φ — однозначные функции от θ и φ, в которые α, β, γ входят в качестве параметров.

$\omega_1 \equiv (\theta_1, \varphi_1)$ — сферические углы в системе $Oxyz$ вектора $v_1 = \mathcal{R}^{-1}v$, который при вращении $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ преобразуется в вектор v. Справедливо равенство $\omega_1 = \Omega$.

Сферическая функция $Y_l^m(\omega)$ соответствует кет-вектору $|lm\rangle$ в представлении $\{\omega\}$:

$$Y_l^m(\omega) = \langle \omega \mid lm \rangle.$$

Вращение $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ преобразует этот вектор в вектор $R(\alpha\beta\gamma)\,|lm\rangle$, составляющие которого в направлении вектора v равны составляющим $|lm\rangle$ по направлению v_1,

$$Y_l^m(\Omega) \equiv \langle \omega_1 \mid lm \rangle = \langle \omega \mid R \mid lm \rangle;$$

отсюда следует формула преобразования сферических функций при вращении

$$Y_l^m(\Omega) = \sum_{m'=-l}^{+l} Y_l^{m'}(\omega)\, R^{(l)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma). \tag{76}$$

Скалярное произведение и теорема сложения. Пусть v и v' — два единичных вектора, ω и ω' — соответствующие им сферические координаты относительно системы $Oxyz$, Ω, Ω' — сферические координаты тех же векторов относительно системы $OXYZ$. Соотношение (76) и унитарность дают

$$\sum_m Y_l^m(\Omega)\, Y_l^{m*}(\Omega') = \sum_m Y_l^m(\omega)\, Y_l^{m*}(\omega'). \tag{77}$$

В частности, если v' направлен вдоль оси OZ, то получаем теорему сложения

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, Y_l^0(\Omega) \equiv \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\Theta) = \sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\theta, \varphi)\, Y_l^{m*}(\beta, \alpha). \tag{78}$$

Выражение $r^{(l)}_{mm'}$ через $\cos\beta$ и $\sin\beta$. Для l целых:

(i) если $(-1)^{m+m'} = +1$, то $r^{(l)}_{mm'}$ — полином по $\cos\beta$ степени l;

(ii) если $(-1)^{m+m'} = -1$, то $r^{(l)}_{mm'} = \sin\beta \times$ (полином по $\cos\beta$ степени $(l-1)$).

В частности,

$$r^{(l)}_{ml}(\beta) = \sqrt{\frac{(2l)!}{(l+m)!\,(l-m)!}}\, \frac{1}{2^l} (1+\cos\beta)^m \sin^{l-m}\beta. \tag{79}$$

Выражения для $R^{(l)}_{mm'}$ при m или $m' = 0$:

$$R^{(l)}_{m0}(\alpha\beta\gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_l^{m*}(\beta, \alpha), \tag{80а}$$

$$R^{(l)}_{0m}(\alpha\beta\gamma) = (-1)^m \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_l^{m*}(\beta, \gamma), \tag{80б}$$

$$R^{(l)}_{00}(\alpha\beta\gamma) = P_l(\cos\beta). \tag{80в}$$

Раздел V. НЕПРИВОДИМЫЕ ТЕНЗОРНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

§ 14. Определение и основные свойства

Определение. Тензорный оператор — совокупность операторов, линейно преобразующихся друг через друга при вращении.

Неприводимый тензорный оператор — набор из $(2k+1)$ операторов $T_q^{(k)}$ $(q=-k, \ldots, +k)$ представляет собой, по определению, *стандартные компоненты неприводимого тензорного оператора* $\boldsymbol{T}^{(k)}$ *порядка* k, если при вращении они преобразуются по формуле

$$RT_q^{(k)}R^{-1}=\sum_{q'=-k}^{+k} T_{q'}^{(k)}R_{q'q}^{(k)}. \tag{81}$$

Векторный оператор — неприводимый тензорный оператор порядка 1. Если V_x, V_y, V_z — его компоненты относительно осей $Oxyz$, то стандартными компонентами являются

$$V_+=-\frac{1}{2}\sqrt{2}\,(V_x+iV_y),\quad V_0=V_z,\quad V_-=\frac{1}{2}\sqrt{2}\,(V_x-iV_y).$$

Скалярный оператор — неприводимый тензорный оператор порядка 0.

Коммутационные соотношения с $\boldsymbol{J}$

$$\left[J_\pm, T_q^{(k)}\right]=\sqrt{k(k+1)-q(q\pm 1)}\;T_{q\pm 1}^{(k)}, \tag{82а}$$

$$\left[J_z, T_q^{(k)}\right]=qT_q^{(k)}. \tag{82б}$$

Эрмитово сопряжение[1])

$$\boldsymbol{S}^{(k)}=\boldsymbol{T}^{(k)\dagger},\ \text{если}\ S_q^{(k)}=(-1)^q\,T_{-q}^{(k)\dagger}. \tag{83}$$

Основное свойство (Вигнер — Эккарт)

$$\langle \tau JM\,|\,T_q^{(k)}\,|\,\tau' J'M'\rangle=\frac{(-1)^{2k}}{\sqrt{2J+1}}\,\langle \tau J\|\boldsymbol{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle\,\langle J'kM'q\,|\,JM\rangle=$$

$$=(-1)^{J-M}\langle \tau J\|\boldsymbol{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle\begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M'\end{pmatrix}. \tag{84}$$

По определению $\langle \tau J\|\boldsymbol{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle$ — *редуцированный матричный элемент*[2]).

Сопряженное соотношение (k — целое)

$$\langle \tau J\|\boldsymbol{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle^*=(-1)^{J'-J}\langle \tau' J'\|\boldsymbol{T}^{(k)\dagger}\|\tau J\rangle. \tag{85}$$

---

[1]) Мы принимаем здесь определение Рака (loc. cit.). При таком определении сферические функции Y_l^m образуют эрмитов тензорный оператор порядка l. Отметим, что тензорное произведение (определенное ниже) коммутирующих неприводимых эрмитовых тензорных операторов в общем случае неэрмитово. Для того, чтобы оно стало эрмитовым, мы должны модифицировать определение эрмитова сопряжения и заменить $(-1)^q$ на $(-1)^{k+q}$. При новом определении сферические функции нечетного порядка антиэрмитовы.

(*N. B.* Наше определение эрмитова сопряжения применимо также к тензорному оператору полуцелого порядка, если множитель $(-1)^q$ записывать как $e^{i\pi q}$.)

[2]) Определение принято такое же, как у Рака (loc. cit.).

Специальные тензорные операторы.
Единичный оператор

$$\langle \alpha J \| \alpha' J' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{JJ'}\sqrt{2J+1}.$$

Оператор полного момента импульса

$$\langle \alpha J \| \boldsymbol{J} \| \alpha' J' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{JJ'}\sqrt{J(J+1)(2J+1)}.$$

§ 15. Тензорное произведение неприводимых тензорных операторов [1])

Определения. Пусть $\boldsymbol{T}^{(k_1)}$, $\boldsymbol{U}^{(k_2)}$ — неприводимые тензорные операторы порядка k_1, k_2 соответственно. По определению $\boldsymbol{T}^{(k_1)} \otimes \boldsymbol{U}^{(k_2)}$ — набор $(2k_1+1)(2k_2+1)$ операторов $T^{(k_1)}_{q_1}U^{(k_2)}_{q_2}$ (не обязательно линейно независимых). Это (приводимый) тензорный оператор.

$\boldsymbol{V}^{(K)} \equiv [\boldsymbol{T}^{(k_1)} \otimes \boldsymbol{U}^{(k_2)}]_K$, *тензорное произведение порядка* K, есть неприводимый тензорный оператор порядка K с компонентами

$$V^{(K)}_Q = \sum_{q_1 q_2} \langle k_1 k_2 q_1 q_2 \,|\, KQ \rangle\, T^{(k_1)}_{q_1} U^{(k_2)}_{q_2} \tag{86}$$

(обязательно должны выполняться неравенства $|k_1 - k_2| \leqslant K \leqslant k_1 + k_2$).

Если $k_1 = k_2 = k$, то определено скалярное произведение [2])

$$S \equiv (\boldsymbol{T}^{(k)}\boldsymbol{U}^{(k)}) = \sum_q (-1)^q T^{(k)}_q U^{(k)}_{-q}. \tag{87}$$

($N.\ B.\ \ S = (-1)^k\sqrt{2k+1}\, V^{(0)}_0$.)

Выражение для редуцированных матричных элементов. Допустим, что мы имеем квантовую систему, состоящую из двух систем 1 и 2 с моментами импульса J_1 и J_2 соответственно ($\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$).

$|\tau_1 J_1 M_1\rangle$ — базисные векторы системы 1,

$|\tau_2 J_2 M_2\rangle$ — базисные векторы системы 2.

$\boldsymbol{T}^{(k_1)}$, $\boldsymbol{U}^{(k_2)}$ — неприводимые тензорные операторы, действующие только на переменные систем 1 и 2 соответственно.

$\boldsymbol{V}^{(K)}$ — тензорное произведение порядка K в соответствии с определением (86).

В стандартном представлении $\{\tau_1\tau_2 J_1^2 J_2^2 J^2 J_z\}$ редуцированные матричные элементы $\boldsymbol{V}^{(K)}$ даются формулой композиции

$$\langle \tau_1\tau_2 J_1 J_2 J \,\|\, \boldsymbol{V}^{(K)} \,\|\, \tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J' \rangle = \sqrt{(2J+1)(2K+1)(2J'+1)} \times$$
$$\times \begin{Bmatrix} J_1' & J_2' & J' \\ k_1 & k_2 & K \\ J_1 & J_2 & J \end{Bmatrix} \langle \tau_1 J_1 \| \boldsymbol{T}^{(k_1)} \| \tau_1' J_1' \rangle \langle \tau_2 J_2 \| \boldsymbol{U}^{(k_2)} \| \tau_2' J_2' \rangle. \tag{88}$$

---

[1]) Во всех следующих формулах мы ограничиваемся тензорными операторами целого порядка.

[2]) При таком определении скалярное произведение двух векторных операторов $(\boldsymbol{V}\boldsymbol{W})$ дается в соответствии с обычным определением выражением $V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z$.

Частные случаи, когда «9J»-символ сводится к «6J»-символу:

$$U=1, \quad K=k_1=k,$$

$$\left\langle \tau_1\tau_2 J_1 J_2 J \left\| T^{(k)} \right\| \tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J' \right\rangle = \delta_{\tau_2\tau_2'}\delta_{J_2J_2'} \left\langle \tau_1 J_1 \left\| T^{(k)} \right\| \tau_1' J_1' \right\rangle \times$$

$$\times (-1)^{J'+J_1+J_2+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} J_1 & k & J_1' \\ J' & J_2 & J \end{Bmatrix}, \qquad (89)$$

$$T=1, \quad K=k_2=k,$$

$$\left\langle \tau_1\tau_2 J_1 J_2 J \left\| U^{(k)} \right\| \tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J' \right\rangle = \delta_{\tau_1\tau_1'}\delta_{J_1J_1'} \left\langle \tau_2 J_2 \left\| U^{(k)} \right\| \tau_2' J_2' \right\rangle \times$$

$$\times (-1)^{J+J_1+J_2'+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} J_2 & k & J_2' \\ J' & J_1 & J \end{Bmatrix}, \qquad (90)$$

$$K=0, \quad k_1=k_2=k,$$

$$\left\langle \tau_1\tau_2 J_1 J_2 JM \left| (T^{(k)}U^{(k)}) \right| \tau_1'\tau_2' J_1' J_2' J' M' \right\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} (-1)^{J+J_2+J_1'} \begin{Bmatrix} J_1 & k & J_1' \\ J_2' & J & J_2 \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \left\langle \tau_1 J_1 \left\| T^{(k)} \right\| \tau_1' J_1' \right\rangle \left\langle \tau_2 J_2 \left\| U^{(k)} \right\| \tau_2' J_2' \right\rangle. \qquad (91)$$

Случай $T^{(k)}=J_1$:

$$\langle J_1 J_2\, J+1 \| J_1 \| J_1 J_2 J\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{[(2S+1)^2-(J+1)^2][(J+1)^2-4d^2]}{J+1}},$$

$$\langle J_1 J_2\, J \| J_1 \| J_1 J_2 J\rangle = \frac{1}{2}\,[2d(2S+1)+J(J+1)]\sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}} =$$

$$= \frac{1}{2}\,[J_1(J_1+1)+J(J+1)-J_2(J_2+1)]\sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}},$$

$$\langle J_1 J_2\, J-1 \| J_1 \| J_1 J_2 J\rangle = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{[(2S+1)^2-J^2][J^2-4d^2]}{J+1}},$$

$$S=\frac{1}{2}(J_1+J_2), \quad d=\frac{1}{2}(J_1-J_2),$$

$$|2d| \leqslant J \leqslant 2S.$$

ДОПОЛНЕНИЕ Г
ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ГРУПП

§ 1. Введение

Уравнения движения исследуемых в квантовой механике систем часто оказываются инвариантными относительно некоторых групп преобразований или, иначе говоря, рассматриваемые наблюдаемые имеют особенно простые трансформационные свойства по отношению к этим группам. Методы теории групп позволяют получить все следствия, которые вытекают из существования этих свойств симметрии.

В действительности, при наличии достаточно богатой интуиции и определенного навыка в обращении с операторами, часто удается использовать свойства симметрии без явного обращения к теории групп. Многие физики предпочитают поступать именно так, несмотря на то, что это означает необходимость время от времени переоткрывать в каждой конкретной задаче «хорошо известные» результаты теории групп, которые необходимы для соответствующих выводов. Однако в ряде разделов физики требуемая доза интуиции и навыков столь велика, что честное и добросовестное использование теории групп неизбежно. Даже в тех случаях, когда имеющиеся симметрии не столь сложны, ссылка на теорию групп, хотя и не является неизбежной, позволяет проще сформулировать задачу и предсказать ряд свойств ее решения.

Данное приложение знакомит читателя с элементами теории групп и может рассматриваться как введение к более подробным работам на эту тему [1]).

В приложениях обсуждаются основные понятия и результаты теории групп, которые наиболее часто используются в квантовой механике. Практически все доказательства опущены, хотя большинство из них, особенно в разделах I и II, весьма просты.

Раздел I. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

§ 2. Определения

Группа. *Множество $\mathcal{G}$ элементов a, b, c, ... образует группу, если выполняются следующие условия:*

---

[1]) Мы отсылаем читателя, в частности, к монографиям: *Е. Вигнер.* loc. cit. стр. 525; *Б. Л. Ван дер Варден.* Методы теории групп в квантовой механике, Харьков, 1938. О непрерывных группах см. *G. Racah.* Group Theory and Spectroscopy, Princeton, 1951 (см. перепечатку в препринте ОИЯИ, R-1869, Дубна, 1964). В настоящее время на русском языке имеется большое число книг, как по теории групп так и по ее приложениям. Помимо ссылок, указанных автором, можно рекомендовать для более подробного ознакомления следующие книги, посвященные изложению методов теории групп и их физических приложений: *М. И. Петрашень, Е. Д. Трифонов.* Применение теории групп в квантовой механике. М., Наука, 1967; *Г. Любарский.* Теория групп и ее применение в физике. М., Наука, 1958; *М. Хамермеш.* Теория групп и ее применение к физическим проблемам. М., Мир, 1966; Сб.: Теория групп и элементарные частицы. М., Мир, 1967. (*Прим. переводчика.*)

(i) *произведение* любых двух элементов также принадлежит множеству $\mathcal{G}$

если [1]) $a \in \mathcal{G}$ и $b \in \mathcal{G}$, то [2]) $ab \in \mathcal{G}$;

(ii) среди элементов множества $\mathcal{G}$ имеется *единичный элемент* I

$I \in \mathcal{G}$ такой, что для всех $a \in \mathcal{G}$, $Ia = aI = a$;

(iii) каждый из элементов имеет обратный, a^{-1}, принадлежащий множеству $\mathcal{G}$

если $a \in \mathcal{G}$ существует $a^{-1} \in \mathcal{G}$ такой, что $a^{-1}a = aa^{-1} = I$;

(iv) произведение элементов *ассоциативно*

$$(ab)\,c = a\,(bc).$$

Конечная группа. Группа, имеющая конечное число элементов N, называется конечной. Число N называется *порядком* группы.

Примеры. Группа пространственных отражений есть конечная группа порядка 2. Двумя ее элементами являются тождественный элемент I и отражение относительно начала координат s; $s^2 = I$. Группа перестановок n объектов $\mathcal{P}_n$ есть конечная группа порядка $n!$.

Непрерывная группа. Группа, имеющая бесконечное число элементов, которые зависят от одного или нескольких параметров, называется непрерывной группой.

Примеры. Группа вращений в пространстве $\mathcal{R}_3$; группа пространственных трансляций.

Абелева группа. Если все элементы группы *коммутируют*

$ab = ba$ для любых a и $b \in \mathcal{G}$,

то группа называется *абелевой*, или *коммутативной* группой.

Примеры. Пространственные отражения, пространственные трансляции, вращения вокруг оси Oz.

§ 3. Классы сопряженных элементов

Сопряженные элементы. Два элемента a и b группы $\mathcal{G}$ называются сопряженными друг другу, если существует элемент $x \in \mathcal{G}$ такой, что

$$b = xax^{-1}.$$

(*N. B.* Элемент x не единственный.)

Если b сопряжено a, то и a сопряжено b, так что сопряжение — рефлексивное соответствие. Более того, если два элемента a и c сопряжены элементу b, то два элемента a и c порознь сопряжены между собой.

Класс сопряженных элементов. Множество элементов группы $\mathcal{G}$, сопряженных данному элементу a, называют классом сопряженных элементов, или просто классом группы $\mathcal{G}$. Элемент a принадлежит определяемому им классу.

Класс элементов, сопряженных b, и класс элементов, сопряженных a, совпадают, если b сопряжено a, в противном случае эти классы не имеют общих элементов. Каждый элемент группы $\mathcal{G}$ принадлежит вполне определенному классу, а вся группа может быть разбита на классы сопряженных элементов.

---

[1]) Запись $a \in \mathcal{G}$ означает: элемент a принадлежит множеству $\mathcal{G}$.

[2]) Преобразование, обозначаемое ab, состоит в последовательном применении преобразования a к результату действия преобразования b. Преобразования ab и ba в общем случае различны.

Если данный элемент группы $\mathcal{G}$ коммутирует со всеми элементами группы, то он образует класс сам по себе. В частности, единичный элемент I образует класс сам по себе.

Пример. Множество вращений $\mathcal{R}(\varphi)$ на один и тот же угол φ, которые различаются только направлением оси вращения, образует класс группы $\mathcal{R}_3$. Каждому значению угла $\varphi(0 \leqslant \varphi < \pi)$ соответствует свой класс этой группы.

§ 4. Подгруппы

Определение. Множество $\mathcal{H}$ называется подгруппой группы $\mathcal{G}$, если оно является группой, все элементы которой содержатся в $\mathcal{G}$.

Примеры. Вращения вокруг оси Oz образуют подгруппу группы $\mathcal{R}_3$; сдвиги, параллельные оси Oz, образуют подгруппу группы пространственных трансляций.

Класс смежности. Если x — элемент группы $\mathcal{G}$, то, используя произвольный элемент h подгруппы $\mathcal{H}$, мы можем образовать новый элемент xh. Обозначим множество всех элементов, построенных таким образом, $x\mathcal{H}$. Имеется взаимнооднозначное соответствие между элементами из $\mathcal{H}$ и элементами из $x\mathcal{H}$.

Следует различать два случая:

(а) если $x \in \mathcal{H}$, то $x\mathcal{H}$ совпадает с $\mathcal{H}$;

(б) если $x \notin \mathcal{H}$, то множество $x\mathcal{H}$ не образует группу, оно называется левым классом смежности подгруппы $\mathcal{H}$.

Правые классы смежности $\mathcal{H}x$ определяются аналогично. В дальнейшем мы будем рассматривать только левые классы смежности. Очевидно, что правые классы смежности имеют те же свойства, что и левые.

Два класса смежности $x_1\mathcal{H}$ и $x_2\mathcal{H}$ либо совпадают, либо не содержат общих элементов вовсе, в зависимости от того, принадлежит или не принадлежит элемент $x_2^{-1}x_1$ подгруппе $\mathcal{H}$.

Каждый элемент из $\mathcal{G}$ принадлежит либо подгруппе $\mathcal{H}$, либо одному из классов смежности $\mathcal{H}$. Подгруппа $\mathcal{H}$ и ее различные классы смежности составляют всю группу $\mathcal{G}$.

Подгруппы, сопряженные подгруппе $\mathcal{H}$. Если $\mathcal{H}$ — подгруппа группы $\mathcal{G}$, а x — элемент $\mathcal{G}$, не принадлежащий $\mathcal{H}$, то множество $x\mathcal{H}x^{-1}$ также является подгруппой в $\mathcal{G}$ и называется подгруппой, *сопряженной* с $\mathcal{H}$.

(*N. B.* Если $x \in \mathcal{H}$, то $x\mathcal{H}x^{-1}$ совпадает с подгруппой $\mathcal{H}$.)

Сопряженные с $\mathcal{H}$ подгруппы не обязаны различаться между собой или быть отличными от $\mathcal{H}$.

Инвариантная подгруппа, фактор-группа. Подгруппа $\mathcal{H}$ называется *инвариантной* подгруппой группы $\mathcal{G}$, если $\mathcal{H}$ совпадает со всеми сопряженными с $\mathcal{H}$ подгруппами

$$\mathcal{H} = x\mathcal{H}x^{-1} \text{ при всех } x \in \mathcal{G}.$$

Эквивалентное определение. Подгруппа группы $\mathcal{G}$ является инвариантной, если ее элементы полностью исчерпывают элементы одного или нескольких классов сопряженных элементов.

(*N. B.* Второе определение особенно полезно при описании всех инвариантных подгрупп данной группы.)

Если $\mathcal{H}$ — инвариантная подгруппа, а $x\mathcal{H}$ и $y\mathcal{H}$ — два ее левых класса смежности, то произведение элемента из $x\mathcal{H}$ на элемент из $y\mathcal{H}$ принадлежит классу смежности $yx\mathcal{H}$

$$(y\mathcal{H})\,(x\mathcal{H}) = (yx\mathcal{H}).$$

(*N. B.* Если $\mathcal{H}$ — инвариантная подгруппа, то $x\mathcal{H} = \mathcal{H}x$.)

Множество, образованное инвариантной подгруппой и всеми ее классами смежности, образует группу, в которой $\mathcal{H}$ является единичным элементом. Эта новая группа называется *фактор-группой* $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ группы $\mathcal{G}$ по $\mathcal{H}$.

Пример. Группа $\mathcal{A}_n$ четных перестановок n объектов является инвариантной подгруппой в $\mathcal{S}_n$. Она имеет один и только один класс смежности — множество нечетных перестановок, так что фактор-группа состоит из двух элементов.

Простая и полупростая группы. Группа называется простой, если единичный элемент является единственной инвариантной подгруппой в ней.

Пример. Группа пространственных вращений.

Группа называется полупростой, если единичный элемент является единственной абелевой инвариантной подгруппой.

Пример. Группа $\mathcal{S}_n$.

§ 5. Изоморфизм, гомоморфизм

Изоморфизм. *Две группы, $\mathcal{G}$ и $\hat{\mathcal{G}}$, называются изоморфными, если существует взаимнооднозначное соответствие между их элементами, сохраняющее закон умножения*, т. е.:

(i) каждому элементу g_i группы $\mathcal{G}$ соответствует один и только один элемент $\hat{g}_i$ из $\hat{\mathcal{G}}$, и наоборот;

(ii) если $g_i g_j = g_k$, то $\hat{g}_i \hat{g}_j = \hat{g}_k$.

Примеры. Преобразования симметрии равностороннего треугольника образуют группу, изоморфную $\mathcal{S}_3$.

Гомоморфизм. Если соответствие между элементами групп $\mathcal{G}$ и $\hat{\mathcal{G}}$ не взаимнооднозначно, то эти группы гомоморфны.

Точнее, группа $\mathcal{G}$ гомоморфна $\hat{\mathcal{G}}$, если:

(i) каждому элементу g_i группы $\mathcal{G}$ соответствует один и только один элемент $\hat{g}_i$ группы $\hat{\mathcal{G}}$, а каждому элементу группы $\hat{\mathcal{G}}$ соответствует по крайней мере один (а возможно, и большее число) элемент группы $\mathcal{G}$;

(ii) из $g_i g_j = g_k$ следует, что $\hat{g}_i \hat{g}_j = \hat{g}_k$.

Если $\mathcal{G}$ имеет инвариантную подгруппу $\mathcal{H}$, то $\mathcal{G}$ гомоморфна фактор-группе $\mathcal{G}/\mathcal{H}$.

Если $\mathcal{G}$ гомоморфна $\hat{\mathcal{G}}$, то множество $\mathcal{H}$ элементов из $\mathcal{G}$, гомоморфных единичному элементу $\hat{\mathcal{I}}$ группы $\hat{\mathcal{G}}$, образует инвариантную подгруппу в $\mathcal{G}$, а множество элементов из $\mathcal{G}$, гомоморфных заданному элементу из $\hat{\mathcal{G}}$, отличному от $\hat{\mathcal{I}}$, образует класс смежности в группе $\mathcal{G}$; фактор-группа $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ изоморфна $\hat{\mathcal{G}}$.

Раздел II. ЛИНЕЙНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ

§ 6. Определения

Группы линейных подстановок. Произведение квадратных матриц ассоциативно. Если множество $n \times n$ матриц удовлетворяет аксиомам (i), (ii) и (iii), определяющим группу, то эти матрицы образуют некоторую группу $\boldsymbol{G}$.

Каждая матрица представляет некоторый линейный оператор G n-мерного векторного пространства $\mathcal{E}_n$ и, следовательно, определяет линейное преобразование векторов этого пространства. Если $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$ — n базисных векторов в $\mathcal{E}_n$ (этот базис не предполагается ортонормированным), то преобразование каждого из них задается уравнением

$$G|k\rangle = \sum_j |j\rangle G_{jk}.$$

Группы указанного типа, которые мы будем обозначать буквами жирного шрифта латинского алфавита, называются *группами* (n-мерных) *линейных подстановок.*

Представление группы. По определению *линейным представлением группы* $\mathcal{G}$ *называют ее гомоморфизм в группу линейных подстановок.*

Пусть $\boldsymbol{G}$ — группа линейных подстановок, а $\mathcal{E}$ — векторное пространство, в котором действуют матрицы, являющиеся элементами этой группы. $\mathcal{E}$ называется *пространством представления*, а число n его измерений называется *размерностью* (или степенью) *представления.*

Если $\mathcal{G}$ изоморфна $\boldsymbol{G}$, то представление называется *точным.* Если же это не так, то элементы из $\mathcal{G}$, гомоморфные единичной матрице 1, образуют инвариантную подгруппу $\mathcal{H}$, и $\boldsymbol{G}$ является точным представлением фактор-группы $\mathcal{G}/\mathcal{H}$.

Одномерные представления. Каждая группа имеет по крайней мере одно одномерное представление — *тривиальное*, или *единичное, представление*, в котором каждый элемент группы представляется числом 1.

Для того чтобы существовали одномерные представления, отличные от тривиального, группа должна иметь инвариантные подгруппы, соответствующие которым фактор-группы абелевы. Все нетривиальные одномерные представления являются представлениями этих абелевых фактор-групп (см. обсуждение группы $\mathcal{P}_n$ в § 17).

Унитарное представление. Представление $\boldsymbol{G}$ называется унитарным, если все матрицы, принадлежащие $\boldsymbol{G}$, унитарны.

Эквивалентные представления. Два представления $\boldsymbol{G}$ и $\boldsymbol{G}'$ называются эквивалентными, если они имеют одинаковую размерность и если каждая матрица $G'(g)$ одного из представлений получается при помощи фиксированного линейного преобразования T из матрицы $G(g)$ другого представления, соответствующей тому же элементу g группы $\mathcal{G}$:

$$G'(g) = TG(g)\,T^{-1} \text{ для всех } g \in \mathcal{G},$$

или

$$\boldsymbol{G}' = T\boldsymbol{G}T^{-1}.$$

Если $\boldsymbol{G}$ и $\boldsymbol{G}'$ — эквивалентные представления, то используется символическая запись

$$\boldsymbol{G}' \approx \boldsymbol{G}.$$

Если отождествить пространства представления $\mathcal{E}$ и $\mathcal{E}'$, то переход от представления $\boldsymbol{G}$ к эквивалентному представлению $\boldsymbol{G}'$ соответствует выбору нового набора базисных векторов в пространстве представления.

Сопряженные представления. Два представления $\boldsymbol{G}$ и $\boldsymbol{G}^*$, матрицы $G(g)$ и $G^*(g)$ которых комплексно сопряжены друг другу, называются сопряженными представлениями.

Представление $\boldsymbol{G}$ называется самосопряженным, если оно эквивалентно своему сопряженному $\boldsymbol{G} \approx \boldsymbol{G}^*$.

Характеры. След матрицы $G(g)$, которая соответствует элементу g в представлении $\boldsymbol{G}$ группы $\mathcal{G}$, называют характером χ элемента g в этом представлении

$$\chi(g) = \operatorname{Tr} G(g).$$

Из свойств следа вытекает, что два элемента из одного и того же класса сопряженных элементов имеют один и тот же характер: *характер является функцией от класса.*

По тем же причинам: *два эквивалентных представления имеют один и тот же набор характеров*:

$$\text{если } G'(g) = TG(g)\,T^{-1}, \text{ то } \chi'(g) = \chi(g).$$

Символически это можно записать так:

$$\text{если } G' \approx G, \text{ то } \chi' = \chi.$$

(*N. B.* Если представление G самосопряжено, то его характеры вещественны.)

§ 7. Операции над пространствами представлений. Приводимость [1])

Прямая сумма. Пусть G^a, G^b — два представления одной и той же группы размерности n_a и n_b соответственно, и пусть $\mathscr{E}_a$, $\mathscr{E}_b$ — соответствующие пространства представления.

Если $|a1\rangle, |a2\rangle, \ldots, |an_a\rangle$ — базисные векторы в $\mathscr{E}_a$, а $|b1\rangle, |b2\rangle, \ldots, |bn_b\rangle$ — в $\mathscr{E}_b$, то линейные подстановки, описывающие преобразование g в этих двух представлениях, определяются законами преобразования базисных векторов

$$g\,[\,|\,a\varkappa\rangle] = \sum_{\lambda} |\,a\lambda\rangle\, G^a_{\lambda\varkappa}(g), \quad g\,[\,|\,b\mu\rangle] = \sum_{\nu} |\,b\nu\rangle\, G^b_{\nu\mu}(g). \tag{1}$$

Прямой суммой $\mathscr{E}_a + \mathscr{E}_b$ пространств $\mathscr{E}_a$ и $\mathscr{E}_b$ называется пространство, растянутое $n_a + n_b$ векторами

$$|\,a1\rangle, |\,a2\rangle, \ldots, |\,an_a\rangle, |\,b1\rangle, \ldots, |\,bn_b\rangle.$$

Матрицы в этом новом пространстве могут быть представлены в виде

$$M \equiv \begin{pmatrix} M_{aa} & M_{ab} \\ M_{ba} & M_{bb} \end{pmatrix},$$

где M_{aa} — $n_a \times n_a$ матрица, переводящая векторы пространства $\mathscr{E}_a$ в векторы из $\mathscr{E}_a$, а M_{bb} — $n_b \times n_b$ матрица, переводящая векторы из $\mathscr{E}_b$ в $\mathscr{E}_b$, M_{ab} — $n_a \times n_b$ — матрица, переводящая векторы пространства $\mathscr{E}_b$ в векторы из $\mathscr{E}_a$. В частности, если A — матрица, оставляющая инвариантным пространство $\mathscr{E}_a$, а B — пространство $\mathscr{E}_b$, то их прямой суммой $A + B$ будет матрица, имеющая блочно-диагональный вид:

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

Отметим, что

$$\mathrm{Tr}\,(A+B) = \mathrm{Tr}\,A + \mathrm{Tr}\,B, \quad \det(A+B) = \det A \cdot \det B. \tag{2}$$

Операция взятия прямой суммы матриц сохраняет единицу и закон матричного умножения

$$1_{(a+b)} = 1_{(a)} + 1_{(b)}, \quad (A_1 + B_1)(A_2 + B_2) = A_1A_2 + B_1B_2.$$

Из сказанного выше следует, что множество G^{a+b} матриц $G^a(g) + G^b(g)$ образует представление группы $\mathscr{G}$. Элементу g соответствует линейная подстановка, которая определяется законами преобразования (1) базисных векторов пространства $\mathscr{E}_a + \mathscr{E}_b$. Характеры этого представления имеют вид: $\chi^{a+b}(g) = \chi^a(g) + \chi^b(g)$, иными словами

$$\chi^{a+b} = \chi^a + \chi^b. \tag{3}$$

[1]) Рассматриваемые в этом параграфе свойства являются общими для множеств матриц. Они сохраняются и в том случае, когда эти множества матриц не образуют группу.

Тензорное произведение (кронекерово или прямое произведение). Операция взятия тензорного произведения пространств или матриц была определена нами ранее (гл. VII).

При образовании тензорного произведения пространств $\mathscr{E}_a$ и $\mathscr{E}_b$ мы получаем $n_a n_b$-мерное пространство $\mathscr{E}_a \otimes \mathscr{E}_b$, базисными векторами которого служат векторы $|ab\varkappa\mu\rangle = |a\varkappa\rangle\,|b\mu\rangle$ ($\varkappa = 1, 2, \ldots, n_a$; $\mu = 1, 2, \ldots, n_b$). Матрицы $G^a(g) \otimes G^b(g)$, полученные тензорным умножением матриц, которые соответствуют элементу g в $\boldsymbol{G}^a$ и $\boldsymbol{G}^b$, образуют представление $\boldsymbol{G}^{ab} \equiv \boldsymbol{G}^a \otimes \boldsymbol{G}^b$ размерности $n_a n_b$ для группы $\mathscr{G}$. В этом представлении заданное преобразование группы действует по правилу

$$g\,[\,|ab\varkappa\mu\rangle] = \sum_{\lambda\nu} |ab\lambda\nu\rangle\, G^a_{\lambda\varkappa}(g)\, G^b_{\nu\mu}(g). \tag{4}$$

Характеры этого представления определяются соотношением

$$\chi^{ab}(g) = \chi^a(g)\,\chi^b(g). \tag{5}$$

Приводимость. *Инвариантным подпространством* пространства $\mathscr{E}$ представления $\boldsymbol{G}$ называется подпространство в $\mathscr{E}$, каждый вектор которого при действии матриц из $\boldsymbol{G}$ линейно преобразуется в другой вектор из этого же подпространства.

Представление $\boldsymbol{G}$ называется:

(i) *неприводимым*, если $\mathscr{E}$ не содержит инвариантных подпространств, отличных от самого пространства $\mathscr{E}$, и нулевого подпространства;

(ii) *приводимым*, если оно не является неприводимым

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 \quad (\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2 \neq 0), \quad \mathscr{E}_1 \text{ — инвариантное подпространство.}$$

Во втором случае, если $\mathscr{E}_2$ также инвариантно, то говорят, что $\boldsymbol{G}$ *разложимо*. При этом можно, используя подходящее линейное преобразование, перевести базисные векторы пространства $\mathscr{E}$ в векторы, целиком лежащие либо в $\mathscr{E}_1$, либо в $\mathscr{E}_2$. В результате получается эквивалентное представление, являющееся прямой суммой представления $\boldsymbol{G}_1$ в $\mathscr{E}_1$ и представления $\boldsymbol{G}_2$ в $\mathscr{E}_2$

$$\boldsymbol{G} \approx \boldsymbol{G}_1 + \boldsymbol{G}_2.$$

Представления $\boldsymbol{G}_1$ и $\boldsymbol{G}_2$ называются *компонентами* представления $\boldsymbol{G}$.

Представление $\boldsymbol{G}$ является *вполне приводимым*, если оно может быть представлено в виде прямой суммы неприводимых компонент

$$\boldsymbol{G} \approx \boldsymbol{G}^{(1)} + \boldsymbol{G}^{(2)} + \ldots \quad (\boldsymbol{G}^{(1)}, \boldsymbol{G}^{(2)}, \ldots \text{ — неприводимы}).$$

Каждое унитарное представление либо неприводимо, либо вполне приводимо.

Матрицы вращений $R^{(j)}$ (Дополнение В, раздел IV) при заданном значении j образуют неприводимое унитарное представление $\boldsymbol{D}^{(j)}$ группы вращений. Строго говоря, $\boldsymbol{D}^{(j)}$ является представлением группы вращений $\mathscr{R}_3$ только при целом j.

Для любого j $\boldsymbol{D}^{(j)}$ является неприводимым представлением группы $\mathscr{U}_2$, инфинитезимальные преобразования которой те же, что и у $\mathscr{R}_3$ («накрывающая группа» группы $\mathscr{R}_3$).

Группа $\mathscr{U}_2$ состоит из двумерных унимодулярных унитарных линейных подстановок, и $\mathscr{R}_3$ является фактор-группой группы $\mathscr{U}_2$. В случае, когда j полуцелое, $\boldsymbol{D}^{(j)}$ является точным представлением группы $\mathscr{U}_2$, и каждому элементу из $\mathscr{R}_3$ соответствуют в $\boldsymbol{D}^{(j)}$ две матрицы противоположного знака.

Все неприводимые представления абелевой группы одномерны (первой степени).

Гомоморфное отображение одного пространства представления на другое. *Линейным отображением пространства $\mathscr{E}_a$ в $\mathscr{E}_b$*

называется линейное соответствие, при котором каждому вектору $|a\rangle$ из $\mathscr{E}_a$ соответствует один и только один вектор $|b\rangle$ из $\mathscr{E}_b$. Соответствие называется *гомоморфным*, если оно сохраняет трансформационные свойства векторов под действием всех преобразований группы, т. е. если из соответствий

$$|a\rangle \to |b\rangle$$

следует, что

$$g[|a\rangle] \to g[|b\rangle] \quad \text{при любом} \quad g \in \mathscr{G}.$$

Отображение $\mathscr{E}_a$ в $\mathscr{E}_b$ полностью определено, если задана $n_b \times n_a$ матрица, которая определяет вектор из $\mathscr{E}_b$, соответствующий каждому базисному вектору в $\mathscr{E}_a$:

$$|a\varkappa\rangle \to \sum_{\mu} |b\mu\rangle S_{\mu\varkappa}. \tag{6}$$

Если отображение гомоморфно, то выполняется матричное равенство

$$S\,G^a(g) = G^b(g)\,S \quad \text{для любого} \quad g \in \mathscr{G},$$

т. е.

$$S\,\boldsymbol{G}^a = \boldsymbol{G}^b S. \tag{7}$$

Если множество векторов $|b\rangle$, соответствующих векторам из $\mathscr{E}_a$, растягивает все пространство $\mathscr{E}_b$ (это предполагает, что $n_a \geqslant n_b$), то мы имеем *отображение $\mathscr{E}_a$ на $\mathscr{E}_b$* (надо понимать как на все $\mathscr{E}_b$). В этом случае все определители матриц $n_b \times n_b$, содержащихся в матрице S, отличны от нуля.

Если соответствие взаимнооднозначно ($n_a = n_b$), то матрица S несингулярна: $\det S \neq 0$. При этом гомоморфное отображение $\mathscr{E}_a$ на $\mathscr{E}_b$ называется *изоморфным соответствием*, и мы имеем

$$\boldsymbol{G}^a \approx \boldsymbol{G}^b.$$

§ 8. Основные теоремы

Применение теории групп в квантовой механике в основном базируется на следующих теоремах.

Лемма Шура. *Если $\boldsymbol{G}^a$ и $\boldsymbol{G}^b$ — два неприводимых представления одной и той же группы и если существует гомоморфное отображение пространства одного из представлений на пространство другого представления, то матрица S, определяющая это отображение* (S удовлетворяет уравнениям (6) и (7)), *имеет следующие свойства*:

а) *если $\boldsymbol{G}^a$ и $\boldsymbol{G}^b$ неэквивалентны, то $S = 0$;*

б) *если $\boldsymbol{G}^a \approx \boldsymbol{G}^b$, то либо $S = 0$, либо $\det S \neq 0$;*

в) *если $\boldsymbol{G}^a \equiv \boldsymbol{G}^b$, то S кратна единичной матрице: $S = c\mathbf{1}$* (c — постоянная).

Следствие. Если квадратная матрица S коммутирует со всеми матрицами *неприводимого* представления $\boldsymbol{G}$ некоторой группы, то она кратна единичной матрице:

$$\text{если } [S, \boldsymbol{G}] = 0, \text{ то } \textit{обязательно } S = c\mathbf{1}.$$

Вполне приводимые представления. Теоремы единственности. Пусть заданы два разложения на *неприводимые* компоненты вполне приводимого представления $\boldsymbol{G}$:

$$\boldsymbol{G} \approx \boldsymbol{G}_1 + \boldsymbol{G}_2 + \ldots + \boldsymbol{G}_p, \quad \boldsymbol{G} \approx \boldsymbol{G}'_1 + \boldsymbol{G}'_2 + \ldots + \boldsymbol{G}'_{p'}.$$

Можно показать, что в этом случае $p = p'$, и существует взаимнооднозначное соответствие между каждым членом первого разложения и эквивалентным

ему членом второго разложения. Иными словами, справедлива следующая теорема.

Теорема единственности I. *Если представление G вполне приводимо, то его разложение на неприводимые компоненты единственно с точностью до эквивалентности.*

Начиная с этого места, если не отмечено особо, мы не будем делать различия между эквивалентными представлениями. Одно и то же неприводимое представление может тогда фигурировать несколько раз в разложении G. Обозначим

$$G^{(1)}, G^{(2)}, \ldots, G^{(j)}, \ldots$$

последовательность *неприводимых представлений группы* $\mathcal{G}$. Согласно теореме единственности каждое вполне приводимое представление G подчиняется соотношению эквивалентности

$$G \approx \sum_j n_j G^{(j)}, \tag{8}$$

в котором последовательность неотрицательных целых чисел $n_1, n_2, \ldots, n_j, \ldots$ определена единственным образом. Аналогично множество характеров представления G удовлетворяет соотношению

$$\chi = \sum_j n_j \chi^{(j)}. \tag{9}$$

Теорема единственности дополняется следующими двумя теоремами.

Теорема II. *Если G вполне приводимо, то и любая компонента G_1 представления G также вполне приводима, а разложение этой компоненты на неприводимые есть сумма определенного числа неприводимых компонент представления G.*

Итак, если $G \approx G_1 + G_2$ и если G может быть разложено согласно соотношению (8), то

$$G_1 \approx \sum_j n_j^1 G^{(j)}, \quad \text{где} \quad n_j^1 \leqslant n_j \quad (j = 1, 2, \ldots).$$

Теорема III. *Если G вполне приводимо и если существует гомоморфное отображение пространства $\mathscr{E}$ представления G на пространство $\mathscr{E}_1$ другого представления G_1 той же группы, то G_1 является компонентой G.*

Теорема III применима, в частности, и тогда, когда каждому базисному вектору $|\varkappa\rangle$ в пространстве $\mathscr{E}$ можно сопоставить вектор $|\hat{\varkappa}\rangle$ из пространства $\mathscr{E}_1$. В такой ситуации векторы $|\hat{\varkappa}\rangle$, растягивающие $\mathscr{E}_1$, не обязаны быть линейно независимыми, но линейно преобразуются друг в друга по тем же матричным формулам, что и векторы $|\varkappa\rangle$, т. е.

$$g\,[\,|\hat{\varkappa}\rangle] = \sum_{\hat{\lambda}} |\hat{\lambda}\rangle\, G_{\lambda\varkappa}(g).$$

В этом случае очевидно, что соответствие $|\varkappa\rangle \to |\hat{\varkappa}\rangle$ устанавливает гомоморфное отображение $\mathscr{E}$ на $\mathscr{E}_1$.

В частности справедливо следующее следствие.

Следствие. *Если пространства, натянутые на векторы $|a\varkappa\rangle$ (с переменным $\varkappa$) и на векторы $|b\mu\rangle$ (с переменным μ), связаны с представлениями G^a и G^b и если тензорное произведение G^{ab} этих представлений вполне приводимо, то представление G', определенное в пространстве, натянутом на произведение векторов $|a\varkappa\rangle\,|b\mu\rangle$, является компонентой G^{ab}.*

(*N. B.* Векторы $|a\varkappa\rangle\,|b\mu\rangle$ не обязаны быть линейно независимыми, если же это так, то $G' \approx G^{ab}$.)

§ 9. Приложения к квантовой механике

Группы, встречающиеся в квантовой механике, являются группами преобразований в пространстве векторов состояния. Эти преобразования почти всегда линейны и унитарны, и мы ограничимся в дальнейшем обсуждении именно такими преобразованиями.

Обозначим $\mathscr{E}$ пространство векторов состояний, а $\mathscr{G}$ — множество унитарных операторов $G_1, G_2, \ldots$, образующих группу.

Пусть $|u\rangle$ — вектор из $\mathscr{E}$. Вектор $|u\rangle$ и векторы $G_1|u\rangle$, $G_2|u\rangle, \ldots$, полученные действием операторов группы на $|u\rangle$, растягивают в общем случае не все пространство $\mathscr{E}$, а лишь подпространство $\mathscr{E}_u$ в нем. $\mathscr{E}_u$ является инвариантным подпространством относительно преобразований группы и связано с некоторым унитарным и, следовательно, вполне приводимым представлением $\boldsymbol{G}^u$ группы $\mathscr{G}$. Мы будем говорить что вектор $|u\rangle$ преобразуется по представлению $\boldsymbol{G}^u$.

Аналогичным образом, если Q — линейный оператор в $\mathscr{E}$, то Q и множество операторов $G_1QG_1^{-1}$, $G_2QG_2^{-1}, \ldots$, полученных действием на Q преобразований группы $\mathscr{G}$, растягивают векторное пространство $\mathscr{E}_Q$ (векторами этого пространства служат операторы), элементы которого линейно преобразуются друг в друга под действием операторов группы. Пространство $\mathscr{E}_Q$ связано с представлением $\boldsymbol{G}^Q$ группы $\mathscr{G}$, которое во всех рассматриваемых ниже случаях будет либо вполне приводимым, либо даже неприводимым. Мы будем говорить, что Q преобразуется по представлению $\boldsymbol{G}^Q$.

По определению оператор Q называется *инвариантным относительно группы* $\mathscr{G}$, если он преобразуется по единичному представлению. В этом случае Q коммутирует со всеми операторами из группы. В более общем случае оператор Q является *компонентой неприводимого тензорного оператора группы* $\mathscr{G}$, если он преобразуется по неприводимому представлению $\boldsymbol{G}^{(j)}$ этой группы.

Неприводимые подпространства $\mathscr{E}(\tau j)$. Стандартное представление группы $\mathscr{G}$. Пространство $\mathscr{E}$ является прямой суммой неприводимых инвариантных подпространств $\mathscr{E}(\tau j)$. Каждое из них связано с некоторым неприводимым представлением $\boldsymbol{G}^{(j)}$ группы $\mathscr{G}$. Индекс τ параметризует пространства, связанные с одним и тем же неприводимым представлением.

Обозначим d_j размерность представления $\boldsymbol{G}^{(j)}$. Пусть $|\tau j\mu\rangle$ (изменяется только μ) — d_j векторов, образующих базис в пространстве $\mathscr{E}(\tau j)$. Поскольку $\boldsymbol{G}^{(j)}$ определяется только с точностью до эквивалентности, то конкретный выбор базиса произволен. Удобно раз и навсегда фиксировать эти векторы, определив стандартный базис в $\mathscr{E}(\tau j)$, в котором каждому элементу группы соответствует вполне определенная матрица $G^{(j)}_{\lambda\mu}$:

$$G\,|\tau j\mu\rangle = \sum_{\lambda=1}^{d_j} |\tau j\lambda\rangle\, G^{(j)}_{\lambda\mu}. \tag{10}$$

В дальнейшем изложении мы будем всегда предполагать, что выбран именно этот стандартный базис.

Множество векторов $|\tau j\mu\rangle$ (изменяются τ, j, μ) образует систему базисных векторов пространства $\mathscr{E}$. Мы будем называть *представление* $\{\tau j\mu\}$ *группы* $\mathscr{G}$ *стандартным*. Термин представление здесь используется в привычном квантовомеханическом смысле. Трансформационные свойства компонент кет-векторов и операторов под действием преобразований из группы $\mathscr{G}$ имеют особенно простой вид в этом представлении. Эти свойства суммируются двумя приводимыми ниже теоремами.

Компоненты кет-векторов и операторов в представлении $\{\tau j\mu\}$.

Теорема А. *Если векторы* $|u1\rangle, \ldots, |u\nu\rangle, \ldots$ *линейно преобразуются друг в друга, подобно базисным векторам унитарного представления* G^a, *т. е. если*

$$G\,|\,u\nu\rangle = \sum_{\rho} |\,u\rho\rangle\, G^a_{\rho\nu},$$

то их компоненты $\langle\tau j\mu\,|\,u\nu\rangle$ *имеют следующие свойства:*

1°. *Если* $G^{(j)}$ *не встречается в разложении*

$$G^a \approx \sum_k n_k G^{(k)} \tag{11}$$

представления G^a *на неприводимые компоненты, то*

$$\langle\tau j\mu\,|\,u\nu\rangle = 0.$$

2°. *Если* $G^{(j)}$ *встречается в разложении* (11) *и если* $\langle a\nu\,|\,\sigma j\mu\rangle$ *— матрица, реализующая это разложение, то*

$$\langle\tau j\mu\,|\,u\nu\rangle = \sum_{\sigma=1}^{n_j} u^j_{\tau\sigma}\,\langle a\nu\,|\,\sigma j\mu\rangle^*, \tag{12}$$

где n_j *постоянных* $u^j_{\tau\sigma}$ *не зависят от* μ *и* ν.

Теорема В. *Если операторы* $Q_1, Q_2, \ldots, Q_\nu, \ldots$ *линейно преобразуются друг в друга, подобно базисным векторам унитарного представления* G^a, *т. е. если*

$$GQ_\nu G^{-1} = \sum_\rho Q_\rho G^a_{\rho\nu},$$

то матричные элементы $\langle\tau_1 j_1\mu_1\,|\,Q_\nu\,|\,\tau_2 j_2\mu_2\rangle$ *имеют следующие свойства:*

1°. *Если* $G^{(j_1)}$ *не встречается в разложении*

$$G^a \otimes G^{(j_2)} \approx \sum_k n_k^{aj_2} G^{(k)} \tag{13}$$

тензорного произведения $G^a \otimes G^{(j_2)}$ на неприводимые компоненты, то

$$\langle\tau_1 j_1\mu_1\,|\,Q_\nu\,|\,\tau_2 j_2\mu_2\rangle = 0.$$

2°. *Если* $G^{(j_1)}$ *имеется в разложении* $G^a \otimes G^{(j_2)}$ *и если* $\langle aj_2\nu\mu_2\,|\,\sigma k\chi\rangle$ *— матрица, реализующая это разложение, то*

$$\langle\tau_1 j_1\mu_1\,|\,Q_\nu\,|\,\tau_2 j_2\mu_2\rangle = \sum_{\sigma=1}^{n_{j_1}^{aj_2}} \langle\tau_1 j_1\,\|\,Q\,\|\,\tau_2 j_2\rangle_\sigma\,\langle aj_2\nu\mu_2\,|\,\sigma j_1\mu_1\rangle^*, \tag{14}$$

где $\langle\tau_1 j_1\,\|\,Q\,\|\,\tau_2 j_2\rangle_\sigma$ есть $n_{j_1}^{aj_2}$ постоянных, не зависящих от μ_1, μ_2 и ν.

Важное замечание. Матричные элементы $\langle a\nu\,|\,\sigma k\chi\rangle$, $\langle aj_2\nu\mu_2\,|\,\sigma k\chi\rangle$ унитарных матриц, которые фигурируют в формулировке теорем, удовлетворяют уравнениям

$$\sum_{\nu\nu'} \langle a\nu\,|\,\sigma k\chi\rangle^*\, G^a_{\nu\nu'} \langle a\nu'\,|\,\sigma' k'\chi'\rangle = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{kk'} G^{(k)}_{\chi\chi'}, \tag{15а}$$

$$\sum_{\substack{\nu\nu'\\ \mu\mu'}} \langle aj\nu\mu\,|\,\sigma k\chi\rangle^*\, G^a_{\nu\nu'} G^{(j)}_{\mu\mu'} \langle aj\nu'\mu'\,|\,\sigma' k'\chi'\rangle = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{kk'} G^{(k)}_{\chi\chi'}. \tag{15б}$$

Эти матричные элементы полностью определяются по заданным представлениям G^a, $G^a \otimes G^{(j)}$ и зависят только от того, как преобразуются векторы $|uv\rangle$ или операторы Q_v под действием группы $\mathcal{G}$.

Доказательство теоремы А. Подействуем унитарным преобразованием $\langle av|\sigma k\chi\rangle$ на базисные векторы $|u1\rangle, |u2\rangle, \ldots, |uv\rangle, \ldots$. В результате получим новый набор базисных векторов

$$|u\sigma k\chi\rangle = \sum_v |uv\rangle\langle av|\sigma k\chi\rangle. \tag{16}$$

Из условия унитарности получаем

$$|uv\rangle = \sum_{\sigma k\chi} |u\sigma k\chi\rangle\langle av|\sigma k\chi\rangle^*. \tag{17}$$

Из определения этого унитарного преобразования следует, что d_k векторов $|u\sigma k\chi\rangle$ (здесь σ, k фиксированы, а меняется χ) растягивают подпространство $\mathscr{E}_u(\sigma k)$ и образуют стандартный базис для представления $G^{(k)}$ в этом подпространстве. Разлагая эти векторы по базисным векторам представления $\{\tau j\mu\}$, имеем

$$|u\sigma k\chi\rangle = \sum_{\tau j\mu} |\tau j\mu\rangle\langle\tau j\mu|u\sigma k\chi\rangle.$$

Матрица $\langle\tau j\mu|u\sigma k\chi\rangle$ (где μ и χ — переменные, а остальные индексы фиксированы), содержащая d_j строк и d_k столбцов, осуществляет гомоморфное отображение пространства $\mathscr{E}_u(\sigma k)$ в $\mathscr{E}(\tau j)$. Поскольку представления в этих пространствах либо неэквивалентны, либо совпадают, то из леммы Шура следует:

$$\langle\tau j\mu|u\sigma k\chi\rangle = \delta_{jk}\delta_{\mu\chi}u^j_{\tau\sigma}, \tag{18}$$

где $u^j_{\tau\sigma}$ — не зависящая от μ постоянная. С учетом этого результата, проектируя обе части равенства (17) на $|\tau j\mu\rangle$, получаем

$$\langle\tau j\mu|uv\rangle = \sum_{k\chi}\delta_{jk}\delta_{\mu\chi}\left(\sum_\sigma u^j_{\tau\sigma}\langle av|\sigma k\chi\rangle^*\right).$$

Оба утверждения теоремы A содержатся в этом равенстве. ■

Доказательство теоремы B. Рассмотрим векторы $Q_v|\tau_2 j_2\mu_2\rangle$ (здесь ν и μ_2 меняются, а τ_2 и j_2 фиксированы). Эти векторы линейно преобразуются друг в друга подобно базисным векторам представления $G^a \otimes G^{(j_2)}$. Отсюда в общем случае не следует, что пространство, растягиваемое этими векторами, связано с этим представлением, так как эти векторы не обязаны быть линейно независимыми. Однако если это представление не совпадает с представлением $G^a \otimes G^{(j_2)}$, то, согласно следствию, соответствующее представление является одной из компонент представления $G^a \otimes G^{(j_2)}$. Несмотря на то, что рассматриваемые векторы могут и не быть линейно независимыми, мы будем оперировать с ними точно так же, как с векторами $|u1\rangle, \ldots, |uv\rangle, \ldots$ в теореме A.

Определим векторы

$$|q\tau_2 j_2\sigma k\chi\rangle = \sum_{\nu\mu_2} Q_\nu|\tau_2 j_2\mu_2\rangle\langle aj_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle. \tag{16'}$$

Из соотношения унитарности для матрицы $\langle aj_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle$ следует:

$$Q_\nu|\tau_2 j_2\mu_2\rangle = \sum_{\sigma k\chi}|q\tau_2 j_2\sigma k\chi\rangle\langle aj_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle^*. \tag{17'}$$

d_k векторов $|q\tau_2 j_2 \sigma k\chi\rangle$ (где χ меняется, а остальные индексы фиксированы) либо все нулевые, либо образуют стандартный базис представления $G^{(k)}$. В последнем случае можно применить теорему *A*. Итак, в любом случае имеем

$$\langle \tau j\mu \,|\, q\tau_2 j_2 \sigma k\chi\rangle = \delta_{jk}\delta_{\mu\chi}\langle \tau j \,\|\, Q \,\|\, \tau_2 j_2\rangle_\sigma,$$

где $\langle \tau j \,\|\, Q \,\|\, \tau_2 j_2\rangle_\sigma$ — постоянные, не зависящие от μ. Следовательно, проектируя обе части равенства (17′) на $|\tau_1 j_1 \mu_1\rangle$, получаем равенство

$$\langle \tau_1 j_1 \mu_1 \,|\, Q_\nu \,|\, \tau_2 j_2 \mu_2\rangle = \sum_{k\chi} \delta_{j_1 k}\delta_{\mu_1\chi}\left(\sum_\sigma \langle \tau_1 j_1 \,\|\, Q \,\|\, \tau_2 j_2\rangle_\sigma \langle a j_2 \nu\mu_2 \,|\, \sigma k\chi\rangle^*\right),$$

из которого следуют оба утверждения теоремы *B*.

Правила отбора. *Если* $|u\rangle$, Q, $|v\rangle$ *преобразуются по представлениям* G^u, G^Q, G^v *соответственно, и если ни одна из неприводимых компонент представления* G^v *не встречается в разложении* $G^Q \otimes G^u$, *то*

$$\langle v \,|\, Q \,|\, u\rangle = 0.$$

Это правило широко используется. В случае, когда G^u и G^v неприводимы, оно следует непосредственно из утверждения 1° теоремы *B*. Однако оно справедливо и в том случае, когда ни одно из представлений G^u, G^Q, G^v не является неприводимым. Для доказательства достаточно заметить, что $Q|u\rangle$ преобразуется (следствие) по представлению $G^Q \otimes G^u$ или по одной из его компонент, и применить теорему *A* к вектору $Q|u\rangle$.

Пример: группа вращений. Теоремы *A* и *B* применимы, в частности, к группе вращений.

Задача сложения двух моментов импульса есть не что иное как конкретное воплощение теоремы *A*. Введенные в § XIII. 25 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ векторов $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ преобразуются как базисные векторы представления $\boldsymbol{D}^{(j_1)} \otimes \boldsymbol{D}^{(j_2)}$, образованного тензорным перемножением неприводимых представлений $\boldsymbol{D}^{(j_1)}$, $\boldsymbol{D}^{(j_2)}$ группы вращений [1]). Согласно результатам раздела V главы XIII разложение этого представления на неприводимые имеет вид

$$\boldsymbol{D}^{(j_1)} \otimes \boldsymbol{D}^{(j_2)} \approx \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \boldsymbol{D}^{(J)}, \tag{19}$$

а элементами унитарной матрицы, осуществляющей это разложение, являются коэффициенты Клебша — Гордана $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$. Поскольку каждое неприводимое представление встречается в разложении (19) не более чем один раз, т. е. $n_J^{j_1 j_2} = 1$ при $J = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1,\ \ldots,\ |j_1 - j_2|$, то сумма в правой части равенства (12) содержит в рассматриваемом случае только один член. Таким образом, компоненты вектора $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ в каждом из подпространств $\mathscr{E}(\tau J)$ известны с точностью до постоянной (не зависящей от M).

Аналогично теорема Вигнера — Эккарта (§ XIII. 32) следует из применения теоремы *B* к компонентам $T_q^{(k)}$ тензорного оператора, неприводимого по отношению к вращениям, т. е. к $(2k+1)$ операторам, преобразующимся как базисные векторы представления $\boldsymbol{D}^{(k)}$.

Матричный элемент $\left\langle \tau_1 j_1 m_1 \,\middle|\, T_q^{(k)} \,\middle|\, \tau_2 j_2 m_2\right\rangle$ определяется выражением (14). Поскольку каждая компонента $\boldsymbol{D}^{(J)}$ представления $\boldsymbol{D}^{(k)} \otimes \boldsymbol{D}^{(j_2)}$ встречается

---

[1]) Термин «группа вращений $\mathscr{R}_3$» используется для упрощения. Фактически имеется в виду «накрывающая группа» $\mathscr{U}_2$ группы $\mathscr{R}_3$.

только один раз в разложении этого представления на неприводимые ($n_J^{k j_2} = 1$ при $J = k + j_2, k + j_2 - 1, \ldots, |k - j_2|$), то сумма в правой части равенства (14) содержит в рассматриваемом случае только один член.

(*N. B.* Определение приведенных матричных элементов $\langle \tau_1 j_1 \| T^{(k)} \| \tau_2 j_2 \rangle$, используемое в главе XIII, отличается от принятого здесь только множителем $\sqrt{2j_1 + 1}$.)

Инвариантные наблюдаемые. $\mathcal{G}$-вырождение. *Наблюдаемая* Q называется *инвариантной* относительно группы $\mathcal{G}$, если

$$[Q, G] = 0 \text{ при всех } g \in \mathcal{G}.$$

d_j векторов $Q|\tau j \mu\rangle$ (τj фиксированы, μ переменно) преобразуются как базисные векторы представления $G^{(j)}$. Теорема B (или, что эквивалентно, теорема A, или лемма Шура) означает в рассматриваемом случае, что

$$\langle \tau j \mu | Q | \tau' j' \mu' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} Q^{(j)}_{\tau\tau'}. \tag{20}$$

Таким образом, Q описывается матрицей особенно простого вида в стандартном представлении группы $\mathcal{G}$.

В таком представлении задача на собственные значения наблюдаемой Q сводится к диагонализации эрмитовых матриц $Q^{(j)}$, элементы $Q^{(j)}_{\tau\tau'}$ которых зависят только от двух индексов τ и τ'. Каждому значению j, таким образом, соответствует некоторое число собственных значений наблюдаемой Q, а именно, — собственные значения $q_1^{(j)}, q_2^{(j)}, \ldots, q_i^{(j)}, \ldots$ матрицы $Q^{(j)}$. *Каждое невырожденное собственное значение этой матрицы является d_j-кратно вырожденным собственным значением наблюдаемой Q.* Каждое p-кратно вырожденное собственное значение матрицы $Q^{(j)}$ является pd_j-кратно вырожденным собственным значением для Q.

Укажем, в частности, следующие два свойства:

1°. если Q инвариантна относительно $\mathcal{G}$, то подпространства, соответствующие каждому из собственных значений наблюдаемой Q, также инвариантны относительно $\mathcal{G}$;

2°. если наблюдаемая Q, инвариантная относительно группы $\mathcal{G}$, определена на конечномерном пространстве, векторы которого преобразуются друг в друга согласно представлению G и если разложение этого представления на неприводимые имеет вид

$$G \approx \sum_k n_k G^{(k)},$$

то число различных собственных значений наблюдаемой Q не превышает $\sum_k n_k$.

Неприводимые тензорные операторы. Если оператор Q преобразуется по представлению G^Q, то всегда можно представить Q в виде суммы операторов, каждый член которой преобразуется по одной из неприводимых компонент представления G^Q. Поэтому неприводимые тензорные операторы заслуживают особого рассмотрения.

По определению компоненты неприводимого тензорного оператора $T^{(k)}$ порядка k линейно преобразуются друг в друга в соответствии с неприводимым представлением $G^{(k)}$. Таким образом, этот оператор определяет d_k-мерное пространство представления $G^{(k)}$. В частности, этот оператор имеет d_k *стандартных компонент* $T^{(k)}_\chi$ (k фиксировано, χ переменно), образующих стандартный базис в указанном пространстве представления. По определению

(см. соотношение (10))

$$GT_{\chi}^{(k)}G^{-1}=\sum_{\rho}T_{\rho}^{(k)}G_{\rho\chi}^{(k)}. \tag{21}$$

Пусть разложение на неприводимые тензорного произведения неприводимых представлений $\boldsymbol{G}^{(g)}$ и $\boldsymbol{G}^{(h)}$ имеет вид

$$\boldsymbol{G}^{(g)}\otimes\boldsymbol{G}^{(h)}\approx\sum_{l}n_{l}^{gh}\boldsymbol{G}^{(l)} \tag{22}$$

и пусть $\langle gh\gamma\eta\,|\,\sigma l\lambda\rangle\left(\sigma=1,\ldots,n_{l}^{gh}\right)$ — элементы унитарной матрицы, реализующей это разложение. В стандартном представлении компоненты $T_{\chi}^{(k)}$ имеют, согласно теореме B, следующие свойства:

$$\left\langle\tau_1 j_1\mu_1\,\middle|\,T_{\chi}^{(k)}\,\middle|\,\tau_2 j_2\mu_2\right\rangle=\begin{cases}0, & \text{если } n_{j_1}^{kj_2}=0\\ \sum\limits_{\sigma=1}^{n_{j_1}^{kj_2}}\left\langle\tau_1 j_1\left\|T_{\chi}^{(k)}\right\|\tau_2 j_2\right\rangle_{\sigma}\langle kj_2\chi\mu_2\,|\,\sigma j_1\mu_1\rangle^{*}, & \text{если } n_{j_1}^{kj_2}\neq 0.\end{cases} \tag{23}$$

Заключение. Из изложенного выше следует, что мы можем использовать во всей полноте свойства кет-векторов и операторов квантовой механики относительно преобразований данной группы, если известны:

(i) все неприводимые представления (с точностью до эквивалентности) данной группы и в каждом из этих представлений определены матрицы, отвечающие выбору стандартного базиса;

(ii) разложения тензорных произведений таких представлений на неприводимые компоненты, и построены матрицы, задающие разложения каждого из таких произведений (т. е. определены коэффициенты n_{l}^{gh} в уравнении (22) и «коэффициенты Клебша — Гордана» $\langle gh\gamma\eta/\sigma l\lambda\rangle$).

Раздел III. КОНЕЧНЫЕ ГРУППЫ

Обозначения:

$\mathscr{F}$ — рассматриваемая группа;
N — порядок группы;
L — число классов ($L\leqslant N$);
$\mathscr{C}$ — класс сопряженных элементов;
l_a — число элементов в классе $\mathscr{C}_a$;
$\boldsymbol{F}$ — представление группы $\mathscr{F}$;
F — матрица, соответствующая элементу f в $\boldsymbol{F}$;
$\boldsymbol{F}^{r}$ — регулярное представление;
f — элемент группы;
I — единичный элемент;
f^{a} — элемент класса $\mathscr{C}_a$;

$k_a\equiv\sum\limits_{i=1}^{l_a}f_i^a$ — сумма элементов класса $\mathscr{C}_a$;

χ — множество характеров представления $\boldsymbol{F}$;

$K_a\equiv\sum\limits_{i=1}^{l_a}F_i^a$

$\chi(a) \equiv \operatorname{Tr} F^a = \frac{1}{l_a} \operatorname{Tr} K_a$;

$F^{(j)}$ — j-ое неприводимое представление (с точностью до эквивалентности);
d_j — размерность представления $F^{(j)}$: $d_j = \chi^{(j)}(I)$;
$F^{(j)}$ — унитарная матрица, соответствующая элементу f в представлении $F^{(j)}$ в фиксированном стандартном базисе;

$F^{(j)}_{\alpha\beta} \equiv (f \mid j\alpha\beta)$ — элемент матрицы $F^{(j)}$, находящийся на пересечении α-й строки и β-го столбца;
$\chi^{(j)}(a) \equiv (a \mid j)$ — характер класса $\mathscr{C}_a$ в представлении $F^{(j)}$.

§ 10. Основные понятия

Лемма о перенумерации. Если $f_1, f_2, \ldots, f_N$ — элементы группы, записанные в определенном порядке, то каждый элемент группы появляется один и только один раз в последовательности $f_1 f, f_2 f, \ldots, f_N f$, которая получается умножением каждого из элементов группы на один и тот же элемент f. Эта последовательность состоит из всех элементов группы, расставленных в другом порядке.

(Все свойства данного параграфа следуют из этой леммы.)

Подгруппа группы $\mathscr{F}$. Если $\mathscr{H}$ — подгруппа группы $\mathscr{F}$ порядка N_h, то N кратно N_h

$$N = hN_h \qquad (h \text{ — целое и } > 0).$$

Целое число h называется *индексом* подгруппы.

Если $\mathscr{H}$ — инвариантная подгруппа, то ее индекс h равен порядку факторгруппы $\mathscr{F}/\mathscr{H}$.

Классы сопряженных элементов. Порядок N кратен l_a — числу элементов в любом из классов сопряженных элементов

$$N = p_a l_a \qquad (p_a \text{ — положительное целое } > 0).$$

Элементы из $\mathscr{F}$, коммутирующие с данным элементом f^a класса $\mathscr{C}_a$, образуют подгруппу индекса l_a.

Групповая алгебра. Сумма k_a элементов класса. Линейные комбинации элементов группы $\sum_{s=1}^{N} x^s f_s$, где $x^1, x^2, \ldots, x^N$ — произвольные комплексные числа, образуют алгебру, которую мы будем называть групповой алгеброй.

L элементов групповой алгебры, которые получаются сложением элементов каждого класса, называются суммами элементов класса

$$k_a = \sum_{i=1}^{l_a} f_i^a \qquad (a = 1, 2, \ldots, L). \tag{24}$$

Эти L элементов коммутируют со всеми элементами групповой алгебры, и любой другой элемент, обладающий этим свойством, является линейной комбинацией сумм элементов класса.

Алгебра сумм элементов класса. Групповая алгебра является коммутативной только в том случае, когда $\mathscr{F}$ — абелева группа. Однако линейные комбинации L операторов k_a образуют коммутативную алгебру, называемую алгеброй сумм элементов класса или центром групповой алгебры. (Ес-

ли группа $\mathscr{F}$ абелева, то алгебра сумм идентична групповой алгебре.) Имеем

$$k_a k_b = k_b k_a = \sum_{c=1}^{L} g_{ab}^c k_c, \tag{25}$$

где коэффициенты g_{ab}^c — *целые* неотрицательные числа.

Будучи линейно независимыми, L сумм элементов класса связаны соотношением (25) и могут быть представлены как функции от меньшего чем L числа сумм.

Каждая сумма k_a удовлетворяет алгебраическому уравнению, порядок которого не превосходит L.

§ 11. Представления

Регулярное представление F^r. Регулярным называют N-мерное представление, которое получается, если за элементы базиса в пространстве представления взять N элементов группы. Векторами пространства регулярного представления служат элементы групповой алгебры.

Все элементы каждой строки и каждого столбца $N \times N$ матрицы, отвечающей элементу f в представлении F^r, равны нулю, кроме одного, равного 1.

Почти все основные свойства представлений группы являются простыми следствиями леммы о перенумерации, леммы Шура и свойств регулярного представления.

Общие свойства представлений. Всякое представление конечной группы эквивалентно *унитарному* представлению этой группы.

Если два представления имеют один и тот же набор *характеров*, то они эквивалентны [1]) (обратное очевидно).

Если $F_1, F_2, \ldots, F_N$ — набор линейных операторов, образующих конечную группу $\mathscr{F}$, и если $|u\rangle$ — заданный вектор в пространстве кет-векторов, то представление F^u, по которому $|u\rangle$ преобразуется под действием элементов группы, является *компонентой регулярного представления* F^r (если F^u имеет размерность N, то $F^u \approx F^r$).

В заданном представлении F суммы $k_1, k_2, \ldots, k_L$ описываются матрицами $K_1, K_2, \ldots, K_L$, которые можно *одновременно* привести к *диагональному* виду и которые коммутируют с каждой матрицей, представляющей элемент группы:

$$[K_a, F] = 0. \tag{26}$$

Неприводимые представления.

а) *Число* неэквивалентных неприводимых представлений равно числу классов L.

б) *Размерность*. Если d_j — размерность j-й неприводимой компоненты $F^{(j)}$, $(j = 1, 2, \ldots, L)$, то

$$N/d_j \text{ — целое}, \tag{27}$$

$$\sum_{j=1}^{L} d_j^2 = N. \tag{28}$$

---

[1]) Это следует из единственности разложения на неприводимые компоненты и из свойства ортогональности характеров неприводимых представлений (см. ниже). Это свойство сохраняется и в случае бесконечных групп, если два рассматриваемых представления вполне приводимы.

в) *Соотношения ортогональности.* Если унитарные неприводимые представления $F^{(j)}$, $F^{(k)}$ либо не эквивалентны, либо равны [1]), то

$$\frac{d_j}{N}\sum_{j=1}^{N}(j \mid j\alpha\beta)\,(j \mid k\gamma\delta)^* = \delta_{jk}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}. \tag{29}$$

Из (29) следует соотношение ортогональности для характеров

$$\sum_{a=1}^{L}\frac{l_a}{N}(a \mid j)\,(a \mid k)^* = \delta_{jk}. \tag{30}$$

Каждое представление вполне определяется стандартным выбором его базисных векторов. N^2 величин

$$\sqrt{\frac{d_j}{N}}\,F^{(j)}_{\alpha\beta} \equiv \sqrt{\frac{d_j}{N}}\,(j \mid j\alpha\beta)$$

$$(j = 1, 2, \ldots, N;\quad j = 1, 2, \ldots, L;\quad \alpha, \beta = 1, 2, \ldots, d_j)$$

являются элементами унитарной $N \times N$ матрицы. Аналогично L^2 величин $\sqrt{l_a/N}\,\chi^{(j)}(a) \equiv \sqrt{l_a/N}\,(a \mid j)$ являются элементами унитарной $L \times L$ матрицы. Из двух соотношений унитарности (29) и (30) получаем соответственно

$$\sum_{j=1}^{L}\sum_{\alpha,\beta=1}^{d_j}\frac{d_j}{N}(j \mid j\alpha\beta)\,(g \mid j\alpha\beta)^* = \delta_{fg}, \tag{31}$$

$$\frac{l_a}{N}\sum_{j=1}^{L}(a \mid j)\,(b \mid j)^* = \delta_{ab}. \tag{32}$$

г) *Специальные случаи.* Если $F^{(k)}$ — единичное представление ($k = 1$), то из (29) и (30) следует

$$\sum_{f=1}^{N}(f \mid j\alpha\beta) = N\delta_{j1}, \qquad \sum_{a=1}^{L} l_a\,(a \mid j) = N\delta_{j1}. \tag{33а}$$

Если g — единичный элемент ($g = I$), то (31) и (32) дают

$$\sum_{j\alpha\beta} d_j\,(f \mid j\alpha\beta) = N\delta_{fI}, \qquad \sum_{j} d_j\,(a \mid j) = N\delta_{aI}. \tag{33б}$$

---

[1]) Доказательство. Если S есть $d_j \times d_k$-матрица, то матрица $T \equiv \sum_{f=1}^{N} F^{(j)}SF^{(k)-1}$ удовлетворяет соотношению $F^{(j)}T = TF^{(k)}$ для всех f (лемма о перенумерации). Следовательно (лемма Шура), матрица T либо тождественно равна нулю, если $F^{(j)}$ и $F^{(k)}$ неэквивалентны, либо кратна единичной, если представления совпадают. Фиксируя S подходящим образом, получаем соотношения (29).

д) *Соотношения между характерами и суммами элементов класса.* Матрицы $K_a^{(j)}$, представляющие k_a, *кратны единичной матрице* (лемма Шура)

$$K_a^{(j)} = k_a^{(j)} 1^{(j)}, \tag{34}$$

$$k_a^{(j)} = \frac{1}{d_j} \operatorname{Tr} K_a^{(j)} = \frac{l_a}{d_j} (a \mid j). \tag{35}$$

Из (25) и (35) следует равенство

$$l_a l_b (a \mid j) (b \mid j) = d_j \sum_{c=1}^{L} g_{ab}^c l_c (c \mid j), \tag{36}$$

из которого в силу соотношения ортогональности (32) имеем

$$g_{ab}^c = \frac{l_a l_b}{N} \sum_{j=1}^{L} \frac{1}{d_j} (a \mid j) (b \mid j) (c \mid j)^*. \tag{37}$$

§ 12. Неприводимые компоненты представления

Общий метод. Для получения коэффициентов n_j разложения представления F на неприводимые компоненты

$$F \approx \sum_{j=1}^{L} n_j F^{(j)} \tag{38}$$

достаточно знать множество его характеров $\chi(a)$ и множество характеров L неприводимых представлений группы. Согласно уравнению (9) и соотношениям (30) имеем

$$n_j = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} l_a (a \mid j)^* \chi (a). \tag{39}$$

(*N. B.* Справедливо соотношение

$$p \equiv \frac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} l_a |\chi(a)|^2 = \sum_{j=1}^{L} n_j^2.$$

Таким образом, равенство $p = 1$ является критерием неприводимости представления F.)

Регулярное представление ($\chi^r(a) = N\delta_{a1}$). Регулярное представление содержит каждое неприводимое представление группы столько раз, какова размерность этого представления

$$F^r \approx \sum_{j=1}^{L} d_j F^{(j)}. \tag{40}$$

(Отсюда следует соотношение (28).)

Тензорное произведение неприводимых представлений.

$$F^{(g)} \otimes F^{(h)} \approx \sum_{j=1}^{L} n_j^{gh} F^{(j)}. \tag{41}$$

Уравнение (9) в рассматриваемом случае имеет вид

$$(a \mid g)(a \mid h) = \sum_{j=1}^{L} n_j^{gh} (a \mid j), \tag{42}$$

а соотношение (39) означает, что

$$n_j^{gh} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} l_a (a \mid g)(a \mid h)(a \mid j)^*. \tag{43}$$

Эти два соотношения следует сравнить с (36) и (37).

Лемма. Представление $F^{(j)}$ столько раз содержится в разложении $F^{(g)} \otimes F^{(h)}$ на неприводимые, сколько раз содержится $F^{(g)}$ в разложении $F^{(j)} \otimes F^{(h)*}$.

(*N. B.* Если все неприводимые представления самосопряжены, то n_j^{gh} симметрично по всем трем индексам.)

Одномерные компоненты. Тензорное произведение $F^{(g)} \otimes F^{(h)}$ двух неприводимых представлений содержит одномерную компоненту не более одного раза. Необходимое и достаточное условие наличия одномерного представления F_1 в разложении этого произведения состоит в эквивалентности

$$F^{(g)} \approx F_1 \otimes F^{(h)*}. \tag{44}$$

В частности, пространство представления $\mathscr{E}_g \otimes \mathscr{E}_h$ рассматриваемого произведения содержит не более одного вектора, инвариантного относительно преобразований группы. Такой вектор существует в том и только в том случае, если

$$F^{(g)} \approx F^{(h)*}. \tag{45}$$

§ 13. Построение неприводимых инвариантных подпространств

Начиная с этого места, мы будем предполагать, что для каждого неприводимого представления $F^{(j)}$ выбран стандартный базис. Мы будем говорить, что вектор имеет тип $(j\mu)$, если он преобразуется как μ-я компонента вектора стандартного базиса представления $F^{(j)}$. В этих предположениях унитарные матрицы $F^{(j)}$ определены однозначно. Таким образом, наша задача состоит в построении стандартного базиса, отвечающего группе $\mathscr{F}$, в пространстве $\mathscr{E}$ представления F, определенного в начале § 12. Мы ограничимся случаем, когда $\mathscr{E}$ порождено действием операторов $F_1, F_2, \ldots, F_N$ группы на заданный вектор $|\rangle$ пространства кет-векторов ($n_j \leqslant d_j$). В квантово-механических приложениях теории групп общий случай всегда можно свести к этому специальному.

Базисные операторы $B_{\mu\nu}^{(j)}$ регулярного представления. Введем N операторов

$$B_{\mu\nu}^{(j)} \equiv \frac{d_j}{N} \sum_{f=1}^{N} (f \mid j\mu\nu)^* F \tag{46}$$

$$(j = 1, 2, \ldots, L;\ \mu, \nu = 1, 2, \ldots, d_j).$$

Из соотношений ортогональности (31) следует, что все N операторов группы являются линейными комбинациями этих операторов

$$F = \sum_{j=1}^{L} \sum_{\mu,\,\nu=1}^{d_j} (f \mid j\mu\nu)\, B^{(j)}_{\mu\nu}. \tag{47}$$

Из унитарности F, леммы о перенумерации и соотношений (29) получаем основные свойства операторов

$$B^{(j)\dagger}_{\mu\nu} = B^{(j)}_{\nu\mu}, \tag{48}$$

$$FB^{(j)}_{\mu\nu} = \sum_{\varkappa} B^{(j)}_{\varkappa\nu}\,(f \mid j\varkappa\mu), \tag{49}$$

$$B^{(j)}_{\mu\nu} B^{(k)}_{\rho\sigma} = \delta_{jk}\delta_{\nu\rho} B^{(j)}_{\mu\sigma}. \tag{50}$$

Согласно (49) N элементов групповой алгебры, описываемые матрицами $B^{(j)}_{\mu\nu}$, образуют стандартный базис регулярного представления.

Построение стандартного базиса при помощи операторов $B^{(j)}_{\mu\nu}$. Если известно как построить операторы $B^{(j)}_{\mu\nu}$, т. е. если известны N^2 матричных элементов $(f \mid j\mu\nu)$, то задача построения стандартного базиса в $\mathscr{E}$ практически решена.

Действительно:

а) если вектор $B^{(j)}_{\mu\nu} \mid \rangle$ отличен от нуля, то он имеет тип $(j\mu)$ (ур. (49));

б) N векторов $B^{(j)}_{\mu\nu} \mid \rangle$ растягивают все пространство $\mathscr{E}$ (ур. (47));

в) d_j^2 векторов $B^{(j)}_{\mu\nu} \mid \rangle$, соответствующих одному и тому же значению индекса j, имеют перечисленные ниже свойства:

(i) d_j векторов, соответствующих одному и тому же значению ν ($\mu = 1, 2, \ldots, d_j$), имеют одну и ту же норму и образуют стандартный базис представления $F^{(j)}$;

(ii) d_j векторов, соответствующих одному и тому же значению μ ($\nu = 1, 2, \ldots, d_j$), растягивают n_j-мерное пространство $\mathscr{E}_{j\mu}$ векторов типа $(j\mu)$. Они связаны друг с другом $(d_j - n_j)$ линейными соотношениями, коэффициенты которых не зависят от μ (в частности, если $n_j = 1$, то эти d_j векторов пропорциональны друг другу и коэффициенты пропорциональности не зависят от μ).

Таким образом, для построения стандартного базиса в $\mathscr{E}$, соответствующего заданной группе, нам необходимо только выбрать для каждого значения j определенное значение $\bar{\mu}$ индекса μ и, используя, например, метод ортогонализации Шмидта, построить n_j базисных векторов в пространстве $\mathscr{E}_{j\bar{\mu}}$:

$$|\tau j\bar{\mu}\rangle = \sum_{\nu=1}^{d_j} c_\nu^{\tau j} B^{(j)}_{\bar{\mu}\nu} \mid \rangle, \quad (\tau = 1, 2, \ldots, n_j),$$

$$\langle \tau j\bar{\mu} \mid \tau' j\bar{\mu}\rangle = \delta_{\tau\tau'}.$$

Тогда векторы

$$|\tau j\mu\rangle = \sum_{\nu=1}^{d_j} c_\nu^{\tau j} B^{(j)}_{\mu\nu} \mid \rangle$$

$$(j = 1, 2, \ldots, L;\ \mu = 1, 2, \ldots, d_j;\ \tau = 1, 2, \ldots, n_j)$$

образуют искомый стандартный базис; d_j векторов $|\tau j\mu\rangle$ (τ и j фиксированы, $\mu = 1, 2, \ldots, d_j$) образуют стандартный базис для представления $F^{(j)}$.

Другие свойства операторов $B^{(f)}_{\mu\nu}$. Проекторы на подпространства $\mathscr{E}_{f\mu}$ и переход от одного из них к другому. Введем обозначения

$$\Pi^{(f)}_{\mu} \equiv B^{(f)}_{\mu\mu} \equiv \frac{d_f}{N}\sum_{f=1}^{N}(f \mid f\mu\mu)^{*}F. \tag{51}$$

Операторы $\Pi^{(f)}_{\mu}$ ($f = 1, 2, \ldots, L$; $\mu = 1, 2, \ldots, d_f$) образуют множество ортогональных проекторов, сумма которых равна 1 [1]):

$$\Pi^{(f)\dagger}_{\mu} = \Pi^{(f)}_{\mu}, \tag{52}$$

$$\Pi^{(f)}_{\mu}\Pi^{(k)}_{\rho} = \delta_{fk}\delta_{\mu\rho}\Pi^{(f)}_{\mu}, \tag{53}$$

$$\sum_{f=1}^{L}\sum_{\mu=1}^{d_f}\Pi^{(f)}_{\mu} = 1. \tag{54}$$

Оператор $\Pi^{(f)}_{\mu}$ есть проектор на пространство $\mathscr{E}_{f\mu}$ векторов типа $(f\mu)$ (ур. (49)). *Разложение единицы* (54) позволяет записать каждый вектор из $\mathscr{E}$ в виде суммы векторов, каждый из которых принадлежит соответствующему подпространству $\mathscr{E}_{f\mu}$:

$$|u\rangle = \sum_{f\mu}\Pi^{(f)}_{\mu}|u\rangle.$$

При $\mu \neq \nu$ оператор $B^{(f)}_{\mu\nu}$ является *оператором перехода* из подпространства $\mathscr{E}_{f\nu}$ в пространство $\mathscr{E}_{f\mu}$. Смысл такого термина очевиден: из уравнений (50) и (48) следует

$$\Pi^{(g)}_{\gamma}B^{(f)}_{\mu\nu}\Pi^{(h)}_{\eta} = \delta_{gf}\delta_{hf}\delta_{\gamma\mu}\delta_{\nu\eta}B^{(f)}_{\mu\nu}, \tag{55}$$

$$B^{(f)\dagger}_{\mu\nu}B^{(f)}_{\mu\nu} = \Pi^{(f)}_{\nu}. \tag{56}$$

Таким образом, оператор $B^{(f)}_{\mu\nu}$, действуя на произвольный вектор, ортогональный подпространству $\mathscr{E}_{f\nu}$, обращает этот вектор в нуль, а при действии на вектор из $\mathscr{E}_{f\nu}$ переводит его в вектор из $\mathscr{E}_{f\mu}$. Тем самым $B^{(f)}_{\mu\nu}$ устанавливает биоднозначное соответствие между подпространствами $\mathscr{E}_{f\nu}$ и $\mathscr{E}_{f\mu}$, сохраняющее скалярное произведение.

Если $|\sigma f\nu\rangle$ — вектор типа $(f\nu)$, то d_f векторов

$$B^{(f)}_{\mu\nu}|\sigma f\nu\rangle \qquad (\mu = 1,2, \ldots, d_f)$$

образуют стандартный базис представления $\boldsymbol{F}^{(f)}$.

Использование сумм элементов класса K_a. Проектор $P^{(f)}$. Если мы можем ограничиться определением неприводимых инвариантных подпространств в пространстве $\mathscr{E}$, то нет необходимости в определении N^2 матричных элементов $F^{(f)}_{\mu\nu} \equiv (f \mid f\mu\nu)$ в стандартном базисе.

---

[1]) Это верно для любого представления $\boldsymbol{F}$ даже в том случае, когда оно не является компонентой $\boldsymbol{F}^r$.

Суммы элементов класса

$$K_a = \sum_{i=1}^{l_a} F_i^a \qquad (a = 1, 2, \ldots, L)$$

имеют по крайней мере один общий набор базисных векторов. Каждому вектору этого набора соответствует некоторая последовательность $k \equiv (k_1, k_2, \ldots, k_L)$ собственных значений операторов K_a. Всего имеется L наборов возможных собственных значений $k^{(1)}, k^{(2)}, \ldots, k^{(L)}$, определяемых соотношением (35), каждый из которых соответствует определенному неприводимому представлению группы. Следовательно, если нам удастся одновременно диагонализовать $K_1, K_2, \ldots, K_L$, то каждая последовательность собственных значений $k^{(j)}$ будет $n_j d_j$-кратно вырождена и соответствующее подпространство $\mathscr{E}_j$ определяет компоненту $n_j \boldsymbol{F}^{(j)}$ представления $\boldsymbol{F}$. Если все n_j равны единице, то разложение $\mathscr{E}$ на неприводимые достигнуто. Если же это не так, то такое же разложение следует провести в каждом из подпространств $\mathscr{E}_j$, для которого $n_j > 1$.

Напомним, что L операторов K являются функциями от меньшего числа этих операторов, и задача диагонализациии будет решена, если мы диагонализуем эти последние операторы.

Задача диагонализации операторов K практически сводится к определению характеров всех неприводимых представлений группы. (Таблицы характеров имеются для большинства групп, используемых в физике. Соответствующая литература указана в первой сноске этого Дополнения.) Действительно, проектор $P^{(j)}$ на подпространство $\mathscr{E}_j$ имеет вид

$$P^{(j)} \equiv \sum_{\mu=1}^{d_j} \Pi_\mu^{(j)} = \frac{d_j}{N} \sum_{f=1}^{N} \chi^{(j)*}(f)\, F = \frac{d_j}{N} \sum_{a=1}^{L} (a \mid j)^* K_a. \qquad (57)$$

Раздел IV. ПЕРЕСТАНОВКИ (ГРУППА $\mathscr{P}_n$)[1])

§ 14. Основные понятия. Циклы. Классы

Определение. Предположим, что нам даны n объектов, распределенных в n «ящиках» например, n частиц в n квантовых состояниях. Перестановкой этих n объектов называется изменение их распределения по этим n «ящикам». Мы можем обозначить объекты целыми числами от 1 до n и определить данную перестановку **символом**

$$p = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \ldots & \alpha_n \\ \beta_1 & \beta_2 & \ldots & \beta_n \end{pmatrix},$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ — целые числа от 1 до n, записанные в произвольном порядке, а $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n$ — те же целые числа, записанные в таком порядке, что объект β_i занимает при новом распределении место объекта с номером α_i в исходном распределении. Так, при перестановке 5 объектов

$$p_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

объект 5 занимает место объекта 1, 3 — место 2 и т. д. Как видно, значение символа перестановки не меняется при изменении в нем расположения столбцов.

---

[1]) Простое и подробное изложение теории таблиц Юнга и их приложения к группе перестановок приведены в книге: *D. E. Rutherford.* Substitutional Analysis, Edinburgh, University Press, 1948. Основы теории группы $\mathscr{P}_n$ содержатся в книге: Б. Л. Ван-дер-Варден. Алгебра. М., Наука, 1976.

Последовательное применение двух перестановок p_a, p_b эквивалентно одной перестановке $p_c \equiv p_b p_a$. Последнюю легко выписать, если верхняя строка символа p_b совпадает с нижней строкой символа p_a. Например, если p_a — определенная выше перестановка, а p_b имеет вид

$$p_b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 3 & 5 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \\ 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix},$$

то $p_c \equiv p_b p_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}$.

В частности, обратной к p будет перестановка, символ которой получается из символа p заменой строк

$$p^{-1} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Перестановки n объектов образуют группу порядка $n!$

Циклические перестановки. Обозначение. Перестановка

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_{k-1} & \alpha_k & \alpha_{k+1} & \dots & \alpha_n \\ \alpha_2 & \alpha_3 & \dots & \alpha_k & \alpha_1 & \alpha_{k+1} & \dots & \alpha_n \end{pmatrix},$$

в которой α_2 занимает место α_1, α_3 — место α_2, ..., α_k — место α_{k-1}, α_1 — место α_k, а остальные $(n-k)$ объектов остаются на своих местах, по определению называется *циклической перестановкой* или *циклом k объектов* $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$; k называется *длиной цикла*. Такую перестановку можно представить символом

$$p = (\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k). \tag{58}$$

Условимся, что первый объект в этой строке α_1 занимает место последнего α_k, а каждый последующий α_i — место предыдущего α_{i-1}. При таком обозначении порядок k элементов определен только с точностью до циклической перестановки.

Два цикла, не имеющие общих элементов, коммутируют.

Произвольная перестановка n объектов равна произведению коммутирующих циклов (эти циклы не имеют общих элементов) *и такое разбиение на циклы единственно.*

Так, определенная выше перестановка p_a равна *произведению двух циклов* (154) и (23) и ее можно записать в виде

$$p_a = (154)\ (23) = (23)\ (154).$$

Аналогично

$$p_b = (14)\ (235), \quad p_c = (125)\ (3)\ (4).$$

Цикл единичной длины эквивалентен тождественному преобразованию и его можно опустить, записав просто $p_c = (125)$. Если такие циклы не опускать, то сумма длин всех циклов перестановки равна n.

Каждая перестановка полностью определяется:

(i) *ее структурой циклов*, т. е. числом циклов h $(h \leqslant n)$ и длинами циклов $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_h$ $(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_h = n)$;

(ii) набором чисел в каждом цикле и порядком этих чисел с точностью до циклической перестановки.

Если обратить порядок следования чисел в каждом цикле, то получится обратная перестановка. Так,

$$p_a^{-1} = (451)\ (32).$$

Классы. *Две перестановки с одинаковой структурой циклов принадлежат к одному классу.* Обратное утверждение также справедливо.

Циклическое обозначение для сопряженного к p элемента $p' = xpx^{-1}$ получается применением перестановки x к последовательности n чисел, фигурирующих в циклическом обозначении p. Например,

$$p_a = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 4 & 2 & 3 \\ 5 & 4 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = (154)\ (23),$$

$$x = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 1 & 3 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 & 3 & 2 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}, \quad x^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \\ 1 & 5 & 4 & 2 & 3 \end{pmatrix},$$

$$p' \equiv xp_a x^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} = (253)\ (41).$$

Транспозиции. Транспозицией называется перестановка двух объектов (цикл длины 2). Транспозиции образуют класс в $\mathscr{P}_n$.

Произвольный цикл данной длины k равен произведению $(k-1)$ транспозиций

$$(\alpha_1\alpha_2 \ldots \alpha_k) = (\alpha_1\alpha_2)\ (\alpha_2\alpha_3) \ldots (\alpha_{k-1}\alpha_k).$$

Вообще, любая перестановка p может быть записана как произведение транспозиций. Такое разбиение не является единственным, но число транспозиций в нем имеет определенную четность, оно либо четное, либо нечетное, что мы будем обозначать как $(-1)^p$. По определению, перестановка называется четной или нечетной в соответствии со знаком $(-1)^p = +1$ или -1.

Подгруппы группы $\mathscr{P}_n$. Группа $\mathscr{A}_n$. Группа $\mathscr{P}_n$ имеет только *одну инвариантную подгруппу* — группу четных перестановок $\mathscr{A}_n$. Индекс $\mathscr{A}_n$ равен 2, дополнением к ней является множество нечетных перестановок, а фактор-группа $\mathscr{P}_n/\mathscr{A}_n$ — абелева.

Среди других подгрупп в $\mathscr{P}_n$ отметим группы перестановок из m объектов $\mathscr{P}_m$, где $m < n$, группы $\mathscr{A}_m$ $(m < n)$ и т. д. Индекс $\mathscr{P}_m$ равен $(n!/m!)$, а индекс $\mathscr{A}_m$ равен 2 $(n!/m!)$.

Симметризаторы и антисимметризаторы группы $\mathscr{P}_n$. Особую роль играют две линейные комбинации всех перестановок группы $\mathscr{P}_n$ — симметризатор s и антисимметризатор a:

$$s \equiv \frac{1}{n!}\sum_p p, \quad a \equiv \frac{1}{n!}\sum_p (-1)^p p, \tag{59}$$

(суммирование происходит по всем элементам $\mathscr{P}_n$). Они коммутируют со всеми элементами группы и обладают следующими свойствами:

$$qs = sq = s, \quad qa = aq = (-1)^q a, \tag{60}$$

(q — произвольная перестановка)

$$s^2 = s, \quad a^2 = a. \tag{61}$$

§ 15. Разбиения

Определение. *Разбиением* $\lambda \equiv [\lambda_1\lambda_2 \ldots \lambda_h]$ целого числа n называется упорядоченная последовательность положительных целых чисел $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_h$, сумма которых равна n:

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_h = n.$$

Поскольку структура циклов перестановки определяется некоторым разбиением числа n, то *каждое разбиение n определяет класс в $\mathscr{P}_n$.*

Неравенства. Пусть $\lambda \equiv [\lambda_1 \dots \lambda_h]$, $\mu \equiv [\mu_1 \dots \mu_k]$ — два разбиения n. По определению

$\lambda = \mu$, если $h = k$ и $\lambda_1 = \mu_1$, $\lambda_2 = \mu_2$, ..., $\lambda_h = \mu_k$;

$\lambda > \mu$, если первый отличный от нуля член в последовательности $\lambda_1 - \mu_1$, $\lambda_2 - \mu_2$, ... положителен;

$\lambda < \mu$, если первый отличный от нуля член в последовательности $\lambda_1 - \mu_1$, $\lambda_2 - \mu_2$, ... отрицателен.

Пример: для $n = 5$ $[5] > [41] > [32] > [31^2]$ и т. д. (Мы использовали условное обозначение $[31^2]$ для $[311]$.)

Диаграммы Юнга Y_λ. Данное разбиение $[\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_h]$ можно представить диаграммой Юнга Y_λ, которая построена из n клеток и состоит из h строк, расположенных одна под другой. Первая строка содержит λ_1 клеток, вторая — λ_2 клеток ..., строка h содержит λ_h клеток (см. рис. 31).

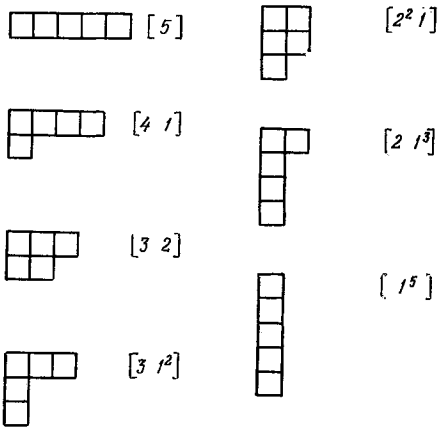


Рис. 31. Разбиения 5-ти элементов и соответствующие диаграммы Юнга.

Таблица Юнга Θ^p_λ. Первые n целых чисел можно расположить в n клетках $n!$ способами, получая всякий раз некоторую *таблицу Юнга*.

Будем обозначать символом Θ_λ и называть *нормальной таблицей* такую, в которой числа 1, 2, ..., n расположены в обычном порядке: последовательность 1, 2, ..., λ_1 в первой строке, $\lambda_1 + 1$; $\lambda_1 + 2$, ..., $\lambda_1 + \lambda_2$ — во второй строке и т. д. Применяя перестановку p к n числам таблицы Θ_λ, мы получим новую таблицу $\Theta^p_\lambda \equiv p\Theta_\lambda$. Отметим, что $q\Theta^p_\lambda = \Theta^{qp}_\lambda$, и для каждой диаграммы Юнга существует $n!$ различных таблиц (см. рис. 32).

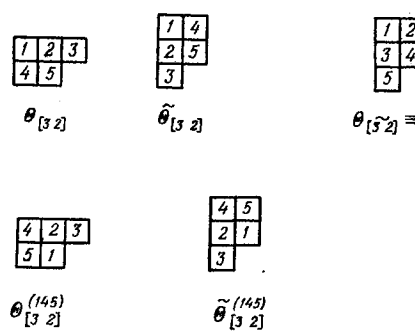


Рис. 32. Несколько таблиц, соответствующих разбиениям $\lambda = [32]$ и $\tilde{\lambda} = [2^2 1]$ 5-ти элементов

Ассоциированные разбиения. Два разбиения называются ассоциированными друг другу, если диаграмма Юнга одного получается из диаграммы Юнга другого заменой строк на столбцы (отражение относительно главной диагонали). В дальнейшем будем обозначать такое преобразование символом $\sim$. Так, $\tilde{\lambda} \equiv [\tilde{\lambda}_1 \dots \tilde{\lambda}_k]$ обозначает разбиение, ассоциированное с $\lambda \equiv [\lambda_1 \dots \lambda_h]$. Отметим, что $k = \lambda_1$, а $h = \tilde{\lambda}_1$ и что $\tilde{\lambda}_s$ равно числу элементов разбиения λ, равных или больших s, и наоборот.

Аналогичным образом определим диаграмму Юнга $\tilde{Y}_\lambda \equiv Y_{\tilde{\lambda}}$, ассоциированную с Y_λ, и таблицу Юнга $\tilde{\Theta}^p_\lambda$, ассоциированную с Θ^p_λ. Отметим (см. рис. 32), что

$$\tilde{\Theta}^p_\lambda = p\tilde{\Theta}_\lambda,$$

но, вообще говоря,

$$\tilde{\Theta}_\lambda \neq \Theta_{\tilde{\lambda}}.$$

§ 16. «Симметризаторы» Юнга. Построение неприводимых представлений

«Симметризаторы» s_λ, a_λ, $\tilde{s}_\lambda$, $\tilde{a}_\lambda$ строк и столбцов Θ_λ. Определим операторы s_λ — симметризатор строк Θ_λ, и a_λ — антисимметризатор строк Θ_λ, следующим образом:

$$s_\lambda \equiv \frac{1}{\lambda_1!\,\lambda_2!\,\ldots\,\lambda_h!}\sum_h h_\lambda, \tag{62}$$

$$a_\lambda \equiv \frac{1}{\lambda_1!\,\lambda_2!\,\ldots\,\lambda_h!}\sum_h (-1)^h h_\lambda, \tag{63}$$

суммирование происходит по всем $\lambda_1!\,\lambda_2!\,\ldots\,\lambda_h!$ перестановкам h, которые оставляют инвариантными *строки* Θ_λ, т. е. в любой цикл которых входят элементы из одной строки Θ_λ. Это множество перестановок h_λ образует подгруппу $\mathscr{P}_{[\lambda]}$ группы $\mathscr{P}_n$. Если обозначить группу перестановок λ_i объектов, стоящих в i-й строке таблицы Θ_λ, $\mathscr{P}_{\lambda_i}$, то $\mathscr{P}_{[\lambda]}$ есть произведение следующих подгрупп группы $\mathscr{P}_n$:

$$\mathscr{P}_{\lambda_1},\ \mathscr{P}_{\lambda_2},\ \ldots,\ \mathscr{P}_{\lambda_h}.$$

Операторы s_λ и a_λ равны соответственно произведению симметризаторов и антисимметризаторов этих h подгрупп.

Аналогичным образом определяются симметризатор $\tilde{s}_\lambda$ и антисимметризатор $\tilde{a}_\lambda$ столбцов Θ_λ (т. е. строк $\tilde{\Theta}_\lambda$). Приведем соответствующие формулы

$$\tilde{s}_\lambda \equiv \frac{1}{\tilde{\lambda}_1!\,\tilde{\lambda}_2!\,\ldots\,\tilde{\lambda}_k!}\sum_v v_\lambda, \tag{64}$$

$$\tilde{a}_\lambda \equiv \frac{1}{\tilde{\lambda}_1!\,\tilde{\lambda}_2!\,\ldots\,\tilde{\lambda}_k!}\sum_v (-1)^v v_\lambda, \tag{65}$$

где суммирование происходит по всем $\tilde{\lambda}_1!\tilde{\lambda}_2!\ldots\tilde{\lambda}_k!$ перестановкам v_λ, которые оставляют инвариантными *столбцы* таблицы Θ_λ.

Основные свойства.

а) Введенные операторы s_λ и a_λ равны произведениям симметризаторов или антисимметризаторов, следовательно,

$$s_\lambda^2 = s_\lambda,\ a_\lambda^2 = a_\lambda,\ \tilde{s}_\lambda^2 = \ldots, \tag{66}$$

$$h_\lambda s_\lambda = s_\lambda h_\lambda = s_\lambda,\ h_\lambda a_\lambda = a_\lambda h_\lambda = (-1)^h a_\lambda,\ v_\lambda \tilde{s}_\lambda = \ldots \tag{67}$$

б) Если $\omega = \sum_p x_p p$ — произвольная линейная комбинация элементов $\mathscr{P}_n$ (элемент групповой алгебры) и если [1])

$$\lambda > \mu \quad \text{или} \quad \tilde{\lambda} < \tilde{\mu}, \tag{68}$$

тогда

$$\tilde{a}_\mu \omega s_\lambda = s_\lambda \omega \tilde{a}_\mu = 0,$$
$$\tilde{s}_\mu \omega a_\lambda = a_\lambda \omega \tilde{s}_\mu = 0. \tag{69}$$

В частности, при выполнении любого из условий (68) справедливы равенства

$$\tilde{a}_\mu s_\lambda = s_\lambda \tilde{a}_\mu = \tilde{s}_\mu a_\lambda = a_\lambda \tilde{s}_\mu = 0. \tag{70}$$

«Неприводимые симметризаторы» i_λ и j_λ.

$$i_\lambda \equiv s_\lambda \tilde{a}_\lambda \equiv \sum_{hv} (-1)^v h_\lambda v_\lambda \quad (i_\lambda \neq 0),$$
$$j_\lambda \equiv \tilde{a}_\lambda s_\lambda \equiv \sum_{hv} (-1)^v v_\lambda h_\lambda \quad (j_\lambda \neq 0). \tag{71}$$

Будем называть i_λ «неприводимым симметризатором», j_λ — «неприводимым антисимметризатором» таблицы Θ_λ. Аналогично определяются неприводимые симметризатор и антисимметризатор $\tilde{\Theta}_\lambda$:

$$\tilde{i}_\lambda \equiv \tilde{s}_\lambda a_\lambda, \quad \tilde{j}_\lambda \equiv a_\lambda \tilde{s}_\lambda.$$

Пусть ω — определенная выше линейная комбинация, тогда можно показать, что

$$s_\lambda \omega \tilde{a}_\lambda = \text{const}\, i_\lambda, \quad \tilde{a}_\lambda \omega s_\lambda = \text{const}\, j_\lambda \tag{72}$$

Из соотношений (69) и (72) легко вывести соотношения

$$i_\lambda i_\mu = i_\mu i_\lambda = \text{const}\, \delta_{\lambda\mu} i_\lambda, \quad j_\lambda j_\mu = j_\mu j_\lambda = \text{const}\, j_\lambda \delta_{\lambda\mu}. \tag{73}$$

Основная теорема.

(i) *В пространстве регулярного представления группы $\mathscr{P}_n$ векторы ωi_λ (ω — произвольный элемент групповой алгебры $\mathscr{P}_n$) натягивают неприводимое инвариантное подпространство $\mathscr{E}_\lambda$ и, следовательно, порождают некоторое неприводимое представление $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$ группы $\mathscr{P}_n$.*

(ii) *Векторы ωj_λ натягивают то же инвариантное подпространство $\mathscr{E}_\lambda$.*

(iii) *Если $\lambda \neq \mu$, то неприводимые представления $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$ и $\boldsymbol{P}^{(\mu)}$ неэквивалентны.*

Поскольку число неприводимых представлений $\mathscr{P}_n$ равно числу классов этой группы и, следовательно, числу разбиений n, то теорема позволяет построить все представления. Как следствие, каждое неприводимое представление группы $\mathscr{P}_n$ можно характеризовать определенной диаграммой Юнга.

Симметризаторы ассоциированных таблиц и ассоциированные представления. Сопоставим каждому элементу $\omega = \sum_p x_p p$

---

[1]) Из справедливости одного из условий (68) не следует справедливость другого. Например, если $\lambda = [4\,1^2]$ и $\mu = [3\,3]$, то $\lambda > \mu$; однако $\tilde{\lambda} = [3\,1^3]$, $\tilde{\mu} = [2^3]$ и, следовательно, $\tilde{\lambda} > \tilde{\mu}$.

групповой алгебры элемент $\omega' = \sum_p (-1)^p x_p p$. Это соответствие — линейное, взаимно однозначное и обладает следующими свойствами:

а) если $\eta = p\omega$, то $\eta' = (-1)^p p\omega'$;

б) если $\zeta = \omega\eta$, то $\zeta' = \omega'\eta'$ (сохраняет произведение).

Отметим, что таким образом возникает взаимно однозначное соответствие между «симметризаторами» ассоциированных таблиц Θ_λ и $\tilde{\Theta}_\lambda$:

$$a_\lambda = s'_\lambda, \quad \tilde{a}_\lambda = \tilde{s}'_\lambda,$$

откуда

$$\tilde{i}_\lambda = \tilde{s}_\lambda a_\lambda = j'_\lambda, \quad \tilde{j}_\lambda = a_\lambda \tilde{s}_\lambda = i'_\lambda. \tag{74}$$

Пусть $\omega_1 i_\lambda, \omega_2 i_\lambda, \ldots,$ — множество базисных векторов, которые согласно основной теореме определяют представление $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$. В силу (74) им соответствуют векторы $\omega'_1 \tilde{j}_\lambda, \omega'_2 \tilde{j}_\lambda, \ldots,$ которые определяют представление $\boldsymbol{P}^{(\tilde{\lambda})}$. Ясно, что при таком выборе базисов матрицы $P^{(\lambda)}$ и $P^{(\tilde{\lambda})}$, отвечающие в каждом из представлений данной перестановке p, связаны соотношением

$$P^{(\tilde{\lambda})} = (-1)^p P^{(\lambda)}. \tag{75}$$

«Симметризаторы таблиц» Θ^p_λ. Точно так же, как мы действовали, используя таблицы Θ_λ, мы можем определить перестановки h^p_λ, v^p_λ и симметризаторы $s^p_\lambda, \ldots, i^p_\lambda, \ldots,$ используя таблицы Θ^p_λ. Отметим, что

$$h^p_\lambda = p h_\lambda p^{-1}, \quad v^p_\lambda = p v_\lambda p^{-1},$$

откуда

$$s^p_\lambda = p s_\lambda p^{-1}, \quad a^p_\lambda = \ldots \text{ и т. д.} \tag{76}$$

Свойства «симметризаторов», связанных с Θ^p_λ, можно вывести, используя свойства «симметризаторов», связанных с Θ_λ, и соотношения (76).

§ 17. Основные свойства неприводимых представлений группы $\mathscr{S}_n$

Большинство свойств неприводимых представлений $\mathscr{S}_n$ следуют из свойств «симметризаторов», которые были приведены в предыдущем параграфе.

Каждое неприводимое представление $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$ группы $\mathscr{S}_n$ характеризуется определенной диаграммой Юнга и может быть построено с помощью неприводимого симметризатора i_λ (или j_λ). Неприводимые представления являются *самосопряженными*

$$\boldsymbol{P}^{(\lambda)*} \approx \boldsymbol{P}^{(\lambda)}. \tag{77}$$

Представления размерности 1. Существует только два представления размерности 1:

(i) тождественное (или симметрическое) представление $\boldsymbol{S}$;

(ii) антисимметрическое представление $\boldsymbol{A}$, в котором каждой перестановке p отвечает $(-1)^p$.

Эти представления порождаются s и a соответственно (ур. (59)).

Диаграмма Юнга для $\boldsymbol{S}$ имеет одну строку и отвечает разбиению $[n]$, а для представления $\boldsymbol{A}$ — один столбец и отвечает разбиению $[1^n]$.

Ассоциированные неприводимые представления. Два неприводимых представления $P^{(\lambda)}$ и $P^{(\tilde{\lambda})}$ называются ассоциированными, если их диаграммы Юнга являются ассоциированными друг к другу. Из уравнения (75) следует соотношение

$$P^{(\tilde{\lambda})} \approx A \otimes P^{(\lambda)}. \tag{78}$$

Компоненты размерности 1 тензорного произведения $P^{(\lambda)} \otimes P^{(\mu)}$. Тензорное произведение двух представлений $P^{(\lambda)} \otimes P^{(\mu)}$ имеет одну (и только одну) компоненту размерности 1 в том и только в том случае, если выполнено одно из следующих условий:

(i) $\lambda = \mu$, то компонентой будет S;

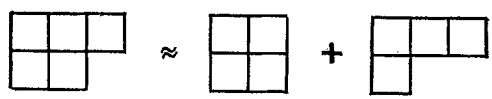
(ii) $\lambda = \tilde{\mu}$, то компонентой будет A.

Неприводимые представления $\mathscr{P}_{n-1}$, содержащиеся в $P^{(\lambda)}$. Любое неприводимое представление группы $\mathscr{P}_n$ есть представление (возможно приводимое) ее подгруппы $\mathscr{P}_{n-1}$.

Обозначим символом $P_t^{(\lambda)}$ неприводимое представление $\mathscr{P}_t$, отвечающее разбиению λ целого числа t. Можно показать, что разложение $P_n^{(\lambda)}$ на представления, неприводимые *по отношению к группе* $\mathscr{P}_{n-1}$, дается формулой

$$P_n^{(\lambda)} \approx \sum_{\mu} P_{n-1}^{(\mu)}, \tag{79}$$

где суммирование происходит по всем разбиениям μ числа $(n-1)$, отвечающим диаграммам Юнга, которые получаются из диаграммы Юнга разбиения λ числа n отбрасыванием одной из возможных клеток.



Пример:

Используя формулу (79) можно связать некоторые характеры $\mathscr{P}_{n-1}$ с характерами $\mathscr{P}_n$. В частности, на основании этой формулы можно вычислить размерность представлений $\mathscr{P}_n$, зная размерность неприводимых представлений $\mathscr{P}_{n-1}$.

Построение неприводимых инвариантных подпространств представления P. Различные «симметризаторы» в представлении P задаются линейными эрмитовыми операторами, которые мы будем обозначать соответствующими прописными буквами.

Метод построения неприводимых компонент представления P следует из основной теоремы § 16. Пусть $|u\rangle$ — произвольный вектор пространства $\mathscr{E}$ представления P; тогда вектор $I_\lambda | u\rangle$ в случае, если он отличен от нуля, преобразуется по представлению $P^{(\lambda)}$, и в соответствующем пространстве представления $\mathscr{E}_\lambda$ содержится ненулевой вектор $J_\lambda | u\rangle$. Множество векторов $I_\lambda | \rangle$, получающихся действием оператора I_λ на векторы базиса пространства $\mathscr{E}$, натягивают подпространство $\mathscr{I}_\lambda$, размерность которого равна n_λ — числу компонент $P^{(\lambda)}$, содержащихся в P. Пусть $|\sigma\rangle$ — один из векторов ортонормированного базиса в $\mathscr{I}_\lambda$, тогда пространство $\mathscr{E}_{\sigma\lambda}$, образованное действием операторов группы на вектор $|\sigma\rangle$, есть пространство представления $P^{(\lambda)}$. Поступая таким образом со всеми n_λ базисными векторами $\mathscr{I}_\lambda$, получим n_λ ортогональных друг другу пространств представления $P^{(\lambda)}$.

Оператор Q в $\mathscr{E}$, инвариантный относительно $\mathscr{P}_n$, переводит векторы каждого из подпространств $\mathscr{T}_\lambda$ в векторы того же подпространства. Таким образом, задача диагонализации Q в пространстве $\mathscr{E}$ сводится к задаче диагонализации этого оператора в каждом из подпространств $\mathscr{T}_\lambda$.

Свойства симметрии векторов представления $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$. В общем случае кет-векторы не обладают определенными свойствами симметрии или антисимметрии. Будем приписывать вектору $|\rangle$ симметрию S_λ в том случае, если он принадлежит подпространству проектора S_λ. Такой вектор симметричен относительно перестановки элементов из одной строки в Θ_λ. Точно так же будем считать вектор A_λ антисимметричным, если он принадлежит подпространству проектора A_λ.

Аналогичным образом, используя таблицы Юнга $\tilde{\Theta}_\lambda$, Θ^p_λ, определяют симметрии типа $\tilde{S}_\lambda$, S^p_λ и антисимметрии $\tilde{A}_\lambda$, A^p_λ [1]).

Из двух векторов с определенной симметрией S^p_λ, S^q_μ более симметричным, по определению, считается тот, который соответствует большему из разбиений λ, μ. Из двух векторов с определенной антисимметрией A^p_λ, A^q_μ более антисимметричным считается тот, который соответствует большему из разбиений λ, μ.

На основании равенств (69) и основной теоремы мы можем сделать вывод, что *пространство неприводимого представления* $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$ *содержит один и только один* S_λ*-симметричный вектор* (и, следовательно, один и только один S^p_λ*-симметричный* вектор, где p — произвольная перестановка) *и не содержит векторов с большей симметрией* [2]). *Это пространство содержит один и только один* $A_{\tilde{\lambda}}$ *— антисимметричный вектор и не содержит векторов с большей антисимметрией.*

Оператор суммы элементов класса транспозиций K_T. Каждому разбиению μ соответствует некоторый класс и оператор суммы элементов класса K_μ. Различные возможные собственные значения $k^{(\lambda)}_\mu$ этого оператора соответствуют различным неприводимым представлениям $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$ группы $\mathscr{P}_n$. Эти собственные значения являются функциями целых чисел $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_h$, участвующих в разбиении λ. (*N. B.* Для двух различных разбиений соответствующие собственные значения некоторого K_μ не обязательно различны: из $\lambda \neq \lambda'$ не следует, что $k^{(\lambda)}_\mu \neq k^{(\lambda')}_\mu$.)

Рассмотрим оператор суммы элементов класса транспозиций K_T:

$$K_T \equiv K_{[21^{n-2}]} = \sum_{i<j} (ij).$$

---

[1]) Перестановка P преобразует любой S_λ-симметричный вектор в $S^p_{\tilde{\lambda}}$-симметричный и любой A_λ-антисимметричный вектор в $A^p_{\tilde{\lambda}}$-антисимметричный (см. соотношения (76)).

Такого соответствия не существует между симметриями типа S_λ, A_λ и $\tilde{S}_\lambda$, $\tilde{A}_\lambda$. Последние эквивалентны симметриям типа $S^q_{\tilde{\lambda}}$, $A^q_{\tilde{\lambda}}$ соответственно, где перестановка q определяется равенством $\tilde{\Theta}_\lambda = q\Theta_{\tilde{\lambda}}$.

[2]) Точнее, не существует S_μ-симметричного вектора, отвечающего любому из разбиений μ, которые удовлетворяют одному из неравенств: $\mu > \lambda$, $\tilde{\mu} < \tilde{\lambda}$.

Оператор K_T коммутирует со всеми перестановками и, следовательно,

$$k_T^{(\lambda)} I_\lambda = K_T I_\lambda = S_\lambda K_T \tilde{A}_\lambda.$$

Используя это соотношение и уравнения (67), легко показать, что $k_T^{(\lambda)}$ равно разности числа транспозиций типа h_λ (симметричных пар) и числа транспозиций типа v_λ (антисимметричных пар):

$$k_T^{(\lambda)} = \sum_{i=1}^{h} \frac{\lambda_i(\lambda_i - 1)}{2} - \sum_{j=1}^{v} \frac{\tilde{\lambda}_j(\tilde{\lambda}_j - 1)}{2}. \tag{80}$$

§ 18. Система n фермионов спина 1/2

Симметрия состояний n тождественных спинов $\frac{1}{2}$.

Теорема. *Пространство векторов состояний n тождественных спинов* $\frac{1}{2}$ *с полным спином (SM) отвечает неприводимому представлению группы* $\mathscr{P}_n$. *Диаграмма Юнга этого представления соответствует разбиению* $\left[\frac{1}{2}n + S, \frac{1}{2}n - S\right]$ (т. е. имеет не более двух строк).

Следствие I. Если $n = 2$, то существует одно антисимметричное состояние со спином $S = 0$ и три линейно независимых симметричных состояния со спином $S = 1$.

Следствие II. Если $n > 2$, то антисимметричных состояний нет; существует $n + 1$ линейно независимых полностью симметричных состояний, а именно, $2S + 1 \equiv n + 1$ состояний, для которых полный спин имеет максимальное значение $\left(S = \frac{1}{2}n\right)$.

Доказательство. Размерность пространства $\mathscr{E}^{(s)}$, которое образовано векторами состояния n спинов $\frac{1}{2}$, равна 2^n. Динамические состояния индивидуального спина с номером i, отвечающие собственным значениям $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$ оператора s_z, обозначим u_i и v_i соответственно. Взяв все возможные произведения из n таких векторов u и v, получим ортонормированный базис в $\mathscr{E}^{(s)}$. Приведем пример базисного вектора

$$\zeta_M = u_1 u_2 \ldots u_\nu v_{\nu+1} \ldots v_n.$$

Это собственный вектор компоненты S_z оператора полного спина

$$S = \sum_{i=1}^{n} s_i;$$

соответствующее собственное значение равно $M = \nu - \frac{1}{2}n$. Действуя на ζ_M всеми перестановками, мы получаем

$$C_n^\nu = \left[n! \Big/ \left(\tfrac{1}{2}n + M\right)! \left(\tfrac{1}{2}n - M\right)!\right]$$

различных векторов, которые натягивают подпространство, отвечающее собственному значению M. Каждый из этих векторов содержит $\frac{1}{2}n+M$ векторов типа u и $\frac{1}{2}n-M$ векторов типа v.

Подпространство с заданным значением M можно разложить на ортогональные подпространства, отвечающие различным возможным собственным значениям оператора S^2. Соответствующее квантовое число S может принимать $\frac{1}{2}n-|M|+1$ значений: $|M|, |M|+1, \ldots, \frac{1}{2}n$. Подпространство, образованное векторами с полным спином (SM), обозначим $\mathscr{E}^{(s)}(SM)$. Поскольку операторы S^2 и S_z коммутируют со всеми перестановками, каждое из этих подпространств определяет некоторое представление группы $\mathscr{P}_n$. Более того, поскольку S_+ и S_- также коммутируют со всеми перестановками, то представления, которые определяются двумя подпространствами с одним и тем же значением S, эквивалентны.

Докажем теперь следствие II (следствие I очевидно). Для доказательства достаточно рассмотреть проекции векторов ортонормированного базиса в $\mathscr{E}^{(s)}$ на пространство симметричных состояний и на пространство антисимметричных состояний. Это легко сделать для определенных выше базисных векторов. Коль скоро $n>2$, то любой вектор базиса ζ содержит не меньше двух отдельных спинов в одинаковом состоянии u или v. Допустим, что в ζ имеется множитель u_iu_j; тогда в силу равенств $A=A\frac{1}{2}(1-(ij))$ и $\frac{1}{2}(1-(ij))u_iu_j=0$, имеем $A\zeta=0$. С другой стороны, существует одна и только одна полностью симметричная линейная комбинация базисных векторов подпространства, отвечающего собственному значению M, а именно, сумма всех C_n^{ν} базисных векторов. Поскольку это верно для любого возможного значения M, то такой полностью симметричный вектор обязательно соответствует максимальному значению полного спина $S=\frac{1}{2}n$. Это завершает доказательство следствия II.

Приведенное выше рассуждение с A можно повторить, используя антисимметризатор $\tilde{A}_\lambda$, и получить, что $\tilde{A}_\lambda\zeta=0$, если диаграмма Юнга содержит больше двух строк. Осюда следует, что диаграммы Юнга для неприводимых компонент представления группы $\mathscr{P}_n$, которое порождено пространством $\mathscr{E}^{(s)}$, имеют, самое большее, две строки.

Пусть $\lambda=[\lambda_1\lambda_2]$ — разбиение числа n, удовлетворяющее этому условию. Число неприводимых компонент $\boldsymbol{P}^{(\lambda)}$ равно числу линейно независимых векторов типа $I_\lambda|\rangle\equiv S_\lambda\tilde{A}_\lambda|\rangle$. Для перечисления последних достаточно рассмотреть табл. I.

Таблица 1

Таблица Θ_λ

1	2		λ_2	λ_2+1		λ_1
λ_1+1	λ_1+2		$\lambda_1+\lambda_2$			

Мы можем разделить n спинов $\frac{1}{2}$ на два множества: $(\lambda_1-\lambda_2)$ элементов $\lambda_2+1, \lambda_2+2, \ldots, \lambda_1$ первой строки, для которых нет соответствующих эле-

ментов во второй, и λ_2 пар элементов, расположенных в соответствующих столбцах. Обозначим полные спины этих множеств S_1 и S_2

$$S = S_1 + S_2.$$

Пусть $S^{(\lambda_1-\lambda_2)}$ — проектор на состояния, симметричные относительно $(\lambda_1 - \lambda_2)!$ перестановок спинов первого множества. Ясно, что

$$I_\lambda = S_\lambda S^{(\lambda_1-\lambda_2)} \widetilde{A}_\lambda.$$

Однако по определению оператор $\widetilde{A}_\lambda$ — проектор на синглетное состояние каждой из пар спинов второго множества. Существует только один вектор, обладающий таким свойством (следствие I), этот вектор соответствует спину $S_2 = 0$. Оператор $S^{(\lambda_1-\lambda_2)}$ проектирует векторы состояний первого множества на подпространство размерности $(2S_1 + 1)$, отвечающее наибольшему возможному значению S_1 (следствие II), а именно, $\frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2)$. Таким образом, $S^{(\lambda_1-\lambda_2)}\widetilde{A}_\lambda$ — проектор на подпространство размерности $(2S + 1)$, отвечающее значению полного спина $S = \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2)$. В силу того, что проектор S_λ коммутирует с S, действуя на векторы этого подпространства, он либо аннулирует их всех, либо преобразует их в векторы с тем же полным спином. Первая возможность исключается, в противном случае в $\mathscr{E}^{(s)}$ не существовало бы векторов с полным спином $\frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2)$, а из второй возможности следует приведенная выше теорема.

Построение полностью антисимметричных векторов. Динамические состояния n фермионов спина $1/2$ принадлежат тензорному произведению $\mathscr{E}^{(0)} \otimes \mathscr{E}^{(s)}$ определенного выше пространство $\mathscr{E}^{(s)}$ и пространства орбитальных переменных $\mathscr{E}^{(0)}$. Последнее можно разложить на взаимно ортогональные, неприводимые подпространства $\mathscr{E}^{(0)}(\sigma\mu)$, инвариантные по отношению к группе $\mathscr{P}_n$. В подпространстве $\mathscr{E}^{(0)}(\sigma\mu)$ определено некоторое неприводимое представление $P^{(\mu)}$, индекс σ нумерует подпространства, в которых задано одно и то же неприводимое представление. Для того чтобы построить полный набор ортогональных антисимметричных векторов, достаточно построить их в каждом из подпространств $\mathscr{E}^{(0)}(\sigma\mu) \otimes \mathscr{E}^{(s)}$. В этом подпространстве имеется столько линейно независимых антисимметричных векторов, сколько раз компонента A встречается в разложении представления, заданного в этом подпространстве. Следовательно (§ 17), число таких векторов равно числу неприводимых представлений $P^{(\mu)}$, участвующих в разложении представления, заданного в $\mathscr{E}^{(s)}$. *Если диаграмма Y_μ содержит более двух столбцов, то таких векторов нет. Если диаграмма Y_μ содержит не более двух столбцов и если мы в согласии с приведенной выше теоремой положим*

$$\mu = \left[2^{\frac{1}{2}n-S}\,1^{2S}\right], \tag{81}$$

тогда имеется $(2S + 1)$ неприводимых представлений, и антисимметричные векторы, которые можно образовать в этом случае, являются собственными векторами оператора S^2, соответствующими полному спину (SM) $(M = -S, -S + 1, \ldots, S)$.

Не зависящие от спина скалярные наблюдаемые. *LS*-связь. Независимую от спина скалярную наблюдаемую Q можно рассма-

тривать как наблюдаемую пространства $\mathscr{E}^{(0)}$, инвариантную относительно вращений и перестановки только орбитальных переменных

$$[Q, \boldsymbol{L}] = 0, \quad [Q, P^{(0)}] = 0.$$

Пространство $\mathscr{E}^{(0)}$ есть прямая сумма подпространств $\mathscr{E}^{(0)}(\tau L\mu)$ размерности $(2L+1)\,d_\mu$, которые неприводимы по отношению к группам вращений и перестановок [1]). L — квантовое число момента импульса, μ — разбиение, отвечающее представлению $\boldsymbol{P}^{(\mu)}$, τ — дополнительное квантовое число, нумерующее эквивалентные подпространства. В частности, подпространства $\mathscr{E}^{(0)}(\tau L\mu)$ можно выбрать так, чтобы наблюдаемая Q в каждом из них была равна некоторой константе $q_\tau^{(L\mu)}$ (см. § 9).

Собственные векторы Q, отвечающие собственному значению $q_\tau^{(L\mu)}$, являются антисимметричными векторами подпространства $\mathscr{E}^{(0)}(\tau L\mu) \otimes \mathscr{E}^{(s)}$. Исходя из предыдущих рассуждений, такие векторы можно построить, только если Y_μ содержит не более двух столбцов. В этом случае разбиение μ однозначно определяется квантовым числом S (ур. (81)). Подпространство антисимметричных векторов в $\mathscr{E}^{(0)}(\tau L\mu) \otimes \mathscr{E}^{(s)}$ отвечает определенному значению S полного спина системы частиц. Это подпространство $\mathscr{E}(\tau LS)$ имеет размерность $(2L+1)(2S+1)$ и в нем можно найти собственные векторы полного момента импульса и полного спина

$$|\,\tau LSM_L M_S\rangle \quad (M_L = -L, \ldots, +L;\ M_S = -S, \ldots, +S),$$

которые образуют стандартный базис $\{\boldsymbol{L}^2 S^2 L_z S_z\}$.

---

[1]) Подпространство $\mathscr{E}^{(0)}(\tau L\mu)$ приводимо относительно группы вращений и является суммой d_μ эквивалентных неприводимых подпространств (здесь d_μ — степень представления $\boldsymbol{P}^{(\mu)}$). Оно также приводимо относительно группы $\mathscr{P}_n$ и является суммой $(2L+1)$ эквивалентных неприводимых подпространств.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Адиабатическая теорема 233, 237, 240—243
Адиабатический переход 232, 236—239
Адиабатическое приближение 243—247, 273, 277—284
Алгебра групповая 560
Амплитуда перехода 296
— —, борновское приближение 327
— —, вычисление вариационным методом 343—350
— —, интегральное представление 324
— рассеяния 107, 292
— —вперед 353
— —, интегральное представление 293—295
Антисимметризатор 89—93, 120, 128, 266, 569
— группы перестановок 569
— Юнга 571
Атом водорода 214, 251, 412—415
— —, основное состояние 258—261
— гелия 185—187
— —, основное состояние 261—262
— сложный 112
— углерода 197
— Фока—Дирака 265—272
— Хартри 265—272
Атомные уровни 195—197

Бозон 95—98, 103, 290
Бозонный газ 97
β-распад 125, 159

Вакуум 443—444, 461
Вектор антисимметричный относительно перестановок 91
— ковариантный 363
— контравариантный 363
— нулевой 364
— пространственно-подобный 364
— симметричный относительно перестановок 91
4-вектор, времениподобный 364
— энергии-импульса 395—396
Векторное поле 52—54
— —, поперечная часть 491
— —, продольная часть 491, 494
Вероятность перехода 219, 221
Вещественные нормальные координаты 501
Взаимодействие, зависящее от спина 54—57
— излучения с частицей 509
— нуклон-нуклонное 55—57
— поля и частицы 457
— спин-орбитальное 54, 198—199, 420
Возбуждение ядер, кулоновское 222—226, 331
Возмущение вырожденного уровня 193—206
— невырожденного уровня 182—193
— первого порядка 184—185
— периодическое 231—232
Волна искаженная 311—320
— плоская 405—407, 451, 504
— свободная сферическая 410—411
Волновая функция частицы спина ½ 50
— — двухкомпонентная 51
Вращение 13, 28—36, 536
— инфинитезимальное 29, 34—36
— наблюдаемых 33—34
— на угол 2π 38—40
Вращения матрица 30, 41, 536—537
— оператор 31—33, 536
Время жизни состояния 469, 475
— собственное 368
Вырождение 473
— Крамерса 172—173
— обменное 84—85, 94
— ротационное 43
— уровней 113
G-вырождение 154, 173

Газ бозонный 97
— фермионный 99
Гамильтониан атома в постоянном магнитном поле 55
— Дирака 374, 405
— — частицы в центральном потенциале 407
— — — во внешнем поле 375
— свободного электромагнитного поля 500
γ-излучение атома 76
γ-матрица 377, 380—384
Гипотеза эргодическая 97
Гиромагнитное отношение 45
Гомоморфизм группы 548
Градиент ковариантный 365
— контравариантный 365
Группа 545
— абелева 546
— Галилея 145, 177
— изотопических вращений 144
— коммутативная 546
— конечная 546, 559
— линейных подстановок 548
— Лоренца 366
— —, неоднородная 365
— —, полная 366
— —, ортохронная 366, 384—388, 391
— —, собственная 367, 388—391
— непрерывная 146, 546
— операторов преобразования 145—146
— перестановок 144, 567
— полупростая 548
— преобразований 140—145
— простая 548
— пространственных преобразований 144
— Пуанкаре 366

Диаграмма Юнга 570, 576
Диамагнитный член 55
Длина рассеяния 348
Дырка 435

Задача на собственные значения 255—257
Закон Лоренца 476
— распада, экспоненциальный 469
— сохранения 154—156
— — изотопического спина 156
— — импульса 398
— — момента импульса 155
— — полного импульса 155
— — — момента импульса 398, 488
— — симметрии относительно перестановок 155
— — четности 155, 398
— — энергии 161
— — энергии-импульса 488
Зарядовая независимость 124—128, 156
Зарядовое сопряжение 399—401, 429
Захват радиационный 483

Излучение кванта 468
γ-излучение атома 76
Изоморфизм групп 548
Изотропность пространства 159
Импульс излучения 496, 504
— механический 368
— поля 451—456, 488
— сопряженный, классического поля 445
Инвариантное подпространство представления 551
Инвариантность относительно перестановок 155
— по отношению к вращениям 40—44, 155, 159
Индекс ковариантный 363
— контравариантный 363
— подгруппы 560
Интеграл движения 154, 397—398
Интерференция 340
Искаженная волна 311—320

Калибровка радиационная 491
Калибровочная инвариантность 401
Калибровочное преобразование 490
— — Лоренца 491
Канал реакции 322
— — входящий 322
— — открытый 323
Катастрофа ультрафиолетовая 512
Квазивырождение 295
Квантовое поле 362, 439
Класс смежности 544
— сопряженных элементов группы 546, 560
Ковариантная компонента тензора 313
Ковариантный вектор 363
— градиент 365
— индекс 363
Константа связи 458
Контравариантная компонента тензора 363
Контравариантный вектор 363
— градиент 365
— индекс 363
Конус световой 365
Координата нормальная 440, 442, 501
Коэффициенты векторного сложения 61—67
— Клебша—Гордана 61—67, 74—76, 175, 524—528, 532
— — —, свойства симметрии 64, 526
— — —, соотношение ортогональности 63, 526
— Рака 67—70, 530, 531
Кулоновская энергия атомных ядер 187—189
Кулоновское возбуждение ядер 222—226, 331

Лагранжиан поля 445
Лемма Шура 143, 552

Магнетон Бора 46
Магнитный момент атома 45
— — внутренний 54
Масса отрицательная 371
— релятивистская 368, 404
Матрица перехода 296, 312, 350—357
S-матрица 353
T-матрица 295, 318, 323
—, свойства инвариантности 355
Матрицы вращения 30, 41
— Дирака 377, 380—384
— Паули 48
γ-матрицы 377, 380—384
Метод Блоха 213
— Борна—Оппенгеймера 274, 283—284
— вариационный 254—290
— — Ритца 254—255
— — для связанных состояний 255—257
— Като 206—213
— Томаса—Ферми 112, 115, 118
Метрика псевдоевклидова 363
Метрический тензор 363
Микрообратимость 354
— упругого рассеяния 297
Множитель Ланде 46, 47, 202, 214
Модель атома Томаса—Ферми 115—118, 199
Молекула двухатомная 284—290
Момент импульса 13—81, 524
— — излучения 496
— —, инвариантное подпространство 20, 21
— —, коммутационные соотношения 14, 15
— — орбитальный 24—26
— — —, собственные состояния 26
— — —, спектр 24—26
— — полный 404, 537
— — —, собственные векторы 61
— — полуцелый 38—40
— — поля 489
— — — орбитальный 498
— —, собственные значения 17—20, 23—24
— — —, функции 20, 21
— —, сохранение 42
— —, спектр 17—20, 24
— —, стандартное представление 21—23
— магнитный 75, 420
Момент мультипольный 75—77
— спина 404
— электрический 76
Море Дирака 435

Наблюдаемые инвариантные 558
— частиц спина ½ 50
Неприводимость по отношению к вращениям 40—41
Нормальные координаты 440, 442, 501
Нуклон 119
Нуль-вектор 364

Обращение времени 161—178, 307, 398—401, 457
— магнитного поля адиабатическое 247—251
— — — мгновенное 235—236
Однородность пространства 158
Оператор антилинейный 131, 135—137, 139—140
— антисимметризации 89—93, 120, 155
— антиунитарный 138, 141, 166
— векторный 14, 15
— Даламбера 365
— зарядового сопряжения 398
— комплексного сопряжения 139, 167—169, 398
— перестановок 86—96
— преобразования 145—146, 395

Оператор рождения 443, 449, 504—505
— симметризации 89—93, 96, 120, 155
— скалярный 70—71
— спина 369
— тензорный неприводимый 70—77, 542—544
— уничтожения 443, 449, 504—505
— четности 397
— числа частиц 444, 449
— эволюции 93, 95, 181, 217, 219, 470
Орбитальные переменные 50
Основное состояние 461, 463, 443—444
Отношение гиромагнитное 45
Отражение координат 161, 367, 391, 457

Переменные орбитальные 50
— спиновые 50
Перенормировка массы 467, 489
Перестановка 567
— циклическая 568
Переход адиабатический 232, 236—239
— мгновенный 232—236
— радиационный 463—469
Плотность тока 404
— 4-тока 379
Поглощение кванта 483
Подгруппа 547, 560
— инвариантная 547
—, индекс 560
—, сопряженная 547
Подобные частицы 86—93
Подпространство инвариантное 205, 551
Позитрон 435
Поле векторное 52—54
— —, поперечная часть 491
— —, продольная часть 491, 494
— квантовое 362, 439, 442
— — свободное 442
— скалярное классическое 440
— спинорное 50, 51
Поляризация круговая и линейная 505
Поправка второго порядка 464
— высшего порядка 189—191, 421
Порядок группы 546
Постоянная тонкой структуры 466
Постулат симметризации 85—96, 98, 110
Потенциал Гаусса 357
— Морса 288, 291
— центральный 307, 407—410
— электромагнитный 365, 490
— Юкавы 357
Правило отбора 62, 75
— Хунда 197
Представление вещественное 168
— вполне приводимое 551
— вращающихся осей 238—239
— Дирака 375—377
— единичное 549
— линейное 548
— неприводимое 551, 561
— приводимое 551
— регулярное 561, 563, 564
— симметрическое 86, 88
— сопряженное 549
— стандартное 554
— тривиальное 549
— унитарное 549
Предетавления эквивалентные 549
Преобразование 140
— антилинейное 137
— антиунитарное 138—141
— калибровочное 490
— — лоренцево 491
— Фолди—Вотхойзена 421—427
Приближение адиабатическое 243—247, 273, 277—284
Приближение борновское 229, 297, 299, 327
— —, критерий применимости 302
— — обобщенное 311, 327—328
— независимых частиц 112
— слабой связи 476
— центрального поля 112—114, 195
Принцип микрообратимости 161, 169—172
— наименьшего действия 446
— соответствия 401
Произведение скалярное 3-векторов 364
— — 4-векторов 364
Пространство—время 363
Прямая сумма представлений 550

Радиационный захват 483
Радиус электрона классический 489
Разбиение целого числа 569
Разложение борновское 301—304, 311
— — обобщенное 314
Размерность представления 549
Рассеяние быстрых электронов на атомах 329
— двукратное, амплитуда 341
—, интегральное представление решения 334
— многократное 341
— неупругое 320
— простое 338
— резонансное 481
— упругое 304, 320
— частицы на двух центрах 335—336
Резольвента 207—210, 471, 483
Резонанс 231—232
Решение с отрицательной энергией 431—435
Ротатор жесткий 191—193

Сверхтонкая структура 55
Связь диполь-дипольная 420
— Рассела—Саундерса 198—202, 214, 235
— слабая 461
jj-связь 214
LS-связь 198—202, 214, 235
Сдвиг во времени 161
— лэмбовский 415
— уровня 464
— фаз, стационарное выражение 343
— —, вариационное вычисление 347
Сечение рассеяния 107, 108, 295, 321
— — геометрическое 304
— — дифференциальное 298
— —, неупругого в борновском приближении 330
— — полное 105, 298
— — Резерфорда 224
Сила Лоренца 368, 495
— тензорная 56, 66
Символы Вигнера 69, 530
— «3*j*» 524
— «6*j*» 69, 530, 532, 535
— «9*j*» 69, 534
— «3*nj*» 67
Симметризатор 89—93, 96, 120, 128, 569
— группы перестановок 569
— Юнга 571
Симметрия 13
Система тождественных частиц 82—129
Скобки Пуассона 147
4-скорость 369
Сложение моментов импульса 57—70, 524—544
— спинов $^1/_2$ 60
Собственная энергия электрона электростатическая 489
Соотношение Бора—Пайерлса—Плачека 353—354

Соотношение Дирака 127
— микрообратимости для T-матрицы 354
— ортогональности 562
Сопряженная подгруппа 547
Сопряженные элементы группы 546
Состояние виртуальное 221
— динамическое 256—259
— микроскопическое 97
— метастабильное 481
— микроскопическое 97
— основное 443—444, 461, 463
— собственное вырожденное 470
— — невырожденное 470, 473
— с отрицательной энергией 431—435
Спектр полосатый 111
Спин 13, 44
— изотопический 118—128
— — полный 120
— поля 498
— ядра 109
— $^1/_2$ 48—55
— 1 50
Спиновые переменные 50
Спинор 50, 391
Спинорное поле 50, 51
Статистика атомных ядер 109—111
— Бозе—Эйнштейна 96—98, 503
— Ферми—Дирака 98—100
Столкновение двух тождественных частиц 103—109
— протонов 107
— сложное 348
— с перераспределением 321
Структура молекул 272—290
— сверхтонкая 420
Сферические функции 26—28
— —, условия на фазу 26

Таблица Юнга 570
Тензор 71
— метрический 363
— неприводимый 71—72
— приводимый 71—72
— электромагнитного поля 365, 369
— энергии-импульса 487
— $\varepsilon^{\mu\nu\lambda\sigma}$ 365
Тензорное произведение представлений 551, 563
Теорема адиабатическая 233, 237, 240—243
— Вигнера—Эккарта 74—75, 77, 200, 201, 225
— оптическая 353
— сложения моментов импульса 58—61
— — — —, основная 59—60
— Эренфеста 233, 237, 240—243
Теория возмущений нестационарная 219—232
— — стационарная 181—215
— излучения 439, 503—520
— Максвелла—Лоренца 485
— Паули 48, 417
— рассеяния 291—358
— —, интегральное уравнение 299—301
Трансляционная инвариантность 155, 158
Транспозиция 569
Тритон 252

Угловой момент 14
Углы Эйлера 28—31, 37, 536
Уравнение Дирака 361, 438
— — в ковариантной форме 377
— —, инвариантность 384—388
— —, нерелятивистский предел 415, 417
— — сопряженное 379
— Клейна—Гордона 370—373, 401, 436, 438, 441
Уравнение Лагранжа 446
— Лоренца 485
— Пуассона 115
— Фока—Дирака 267—270
— Хартри 272
— Шредингера 93, 106, 240
— — нестационарное 202—253
Уравнения гамильтоновы классической релятивистской частицы 369
— Максвелла 488
Условие Лоренца 491

Фазовый множитель, выбор 525
Фактор-группа 547
Фермионный газ 99
Фермионы 95, 98—104, 290
Физическая наблюдаемая 39—40
Формула Вигнера 80, 539—540
— Мотта 108
— Рака 528, 533
— Резерфорда 306
Форм-фактор плотности электронов 305
Фотон 460, 503, 506
Фотоэлектрический эффект 252, 483, 522
Функция антисимметричная относительно перестановок 84
— базисная комплексная 499
— Гамильтона классической релятивистской частицы 369
— Грина 292, 307, 308, 315, 334, 344, 481
— — искаженных волн 315—318
— — как оператор 308
— Грина, разложение 307
— — свободная 292—311
— Лагранжа 446
— обрезающая 459
— симметричная относительно перестановки аргументов 84
— сферическая 26—28, 74, 540
— —, условие на фазу 26
— Томаса—Ферми 117

Характер 549, 561

Частица в статическом потенциале 163—164
— спина $^1/_2$ 50—52
— спина 1 52—54
Частицы тождественные 82
Частота Бора 219, 246, 476
Четность 155, 404
— перестановки 90

Ширина линии 470

Эквивалентные представления 549
Эксперимент Штерна—Герлаха 47
Электрон в кулоновском поле 412—415
— — центральном электростатическом потенциале 427
— — электромагнитном поле 54, 420
— свободный 405
Энергия 404
— излучения 496
— отрицательная 431
— поля 488
Эргодическая гипотеза 97
Эффект Зеемана 46, 201, 214, 159, 161
— — аномальный 47
— Пашена—Бака 203, 235
— Рамзауэра—Таунсенда 304
— фотоэлектрический 252, 483, 522
— Штарка 159—285
— — для жесткого ротатора 304