

КАЧЕСТВЕННЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Книга посвящена качественным методам теоретической физики (размерные и модельные оценки, изучение предельных случаев, использование аналитических свойств и свойств симметрии физических величин).

Применение качественных методов иллюстрируется на многочисленных физических задачах из различных областей квантовой теории.

Задача книги — научить начинающих физиков правильному подходу к исследовательской работе в области теоретической физики.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7	Ионизация атомов (45).	
Глава 1		Многократное рассеяние (46).	
Размерные и модельные оценки	9	3. Взаимодействие с излучением	48
1. Оценки математических выражений	12	Нулевые колебания электромагнитного поля (48).	
Оценка производной (12).		Фотоэффект (51).	
Оценки интегралов (13).		Времена жизни возбужденных состояний атома (55).	
Метод перевала (18).		Тормозное излучение (57).	
Свойства интегралов от осциллирующих функций. Оценки далеких членов ряда Фурье (21).		Образование пар (60).	
Оценки решений дифференциальных уравнений (27).		Рождение мягких квантов при рассеянии заряженных частиц («инфракрасная катастрофа») (62).	
2. Атомная механика	32	Лэмбовское смещение (68).	
Оценки скоростей и размеров орбит внутренних электронов атома (32).		Асимптотический характер рядов в квантовой электродинамике (71).	
Стационарные состояния (33).		Глава 2	73
Распределение электрического заряда в атоме (37).		Различные случаи теории возмущений	
Формула Резерфорда (39).		1. Теория возмущений в непрерывном спектре Рассеяние заряженных частиц на атомном ядре (80).	75
Неприменимость классической механики при больших прицельных параметрах (40).		2. Возмущение граничных условий Энергетические уровни деформированного ядра (82).	81
Оценка сечения рассеяния для потенциалов, спадающих с (расстоянием быстрее, чем кулоновский (42).		3. Внезапные возмущения	85
Резонансные эффекты при рассеянии (43).		Ионизация атомов при β -распаде (87).	
Взаимодействие между атомами (44).		Ионизация атомов при ядерных реакциях (89).	
		Передача энергии при вылете	

кванта из ядра молекулы (эффект Мессбауэра) (92).		компонентами Фурье классического движения (134).	
4. Адиабатические возмущения	94	Критерий применимости теории возмущений для расчета не слишком малых величин (135).	
Ионизация атома при пролете медленной тяжелой частицы (97).		Вычисление матричных элементов в случае сильно осциллирующих функций (137).	
Захват атомного электрона протоном (перезарядка) (99).		Прохождение через барьер (143).	
5. Быстрая и медленная подсистемы	103	Надбарьерное отражение (149).	
Колебательные уровни энергии молекулы (105).		2. Трехмерная задача	152
Возбуждение ядерных дипольных уровней быстрой частицей (108).		Центрально-симметричное поле (152).	
Рассеяние протона на атоме водорода (перезарядка) (111).		Модификация центробежного потенциала (152).	
6. Теория возмущений в случае близких уровней	113	Уровни энергии в кулоновском поле (153).	
Частица в периодическом потенциале (115).		Квазиклассическое представление сферических функций (155).	
Штарк-эффект в случае близких уровней (116).		Распределение Томаса — Ферми в атоме (158).	
Изменение времени жизни состояния $2s_{1/2}$ атома водорода во внешнем электрическом поле (118).		Оценки ядерных матричных элементов (162).	
Глава 3		Нецентральный потенциал (165).	
Квазиклассическое приближение	121	Квазиклассическая задача рассеяния (165).	
1. Одномерная задача	123	Сечение рассеяния протона на атоме водорода (168).	
Асимптотические ряды (124).		Глава 4	
Сшивание квазиклассических функций (125).		Аналитические свойства физических величин	170
Условие квантования (129).		Зависимость момента инерции ядра от деформации (173).	
Точность квазиклассического приближения (131).		Зависимость частоты звука от волнового вектора (174).	
Нормировка квазиклассических функций (132).		1. Аналитические свойства диэлектрической постоянной	175
Принцип соответствия (133).		Аналитические свойства диэлектрической постоянной в простой модели (178).	
Средняя кинетическая энергия (133).		2. Аналитические свойства амплитуды рассеяния	181
Связь квазиклассических матричных элементов с		Унитарность как следствие	

принципа суперпозиции и сохранения вероятности (181).		2. Графический метод	225
Дисперсионное соотношение (183).		Графическое изображение процессов (225).	
Резонансное рассеяние при малых энергиях (184).		Взаимодействие между квазичастицами (237).	
Нерезонансное рассеяние при малых энергиях (188).		Локальное взаимодействие квазичастиц (242).	
Рассеяние на потенциальной яме (190).		3. Решение задач методом функций Грина	244
Аналитические свойства волновой функции (191).		Уравнение Дайсона. Обоснование модели оболочек (244).	
Одночастичные функции сплошного спектра при малой энергии (192).		Неустойчивость фермиевского распределения в случае притяжения. Возникновение щели в энергетическом спектре (248).	
3. Использование аналитических свойств в физических задачах	194	Энергетический спектр бозе-систем. Сверхтекучесть (254).	
Теория ядерных реакций с образованием медленных частиц (194).		4. Система во внешнем поле	261
Взаимодействующие частицы в потенциальной яме (198).		Изменение распределения частиц в поле (263).	
Теория прямых реакций (201).		Спиновая поляризуемость и магнитный момент квазичастицы (264).	
Пороговые особенности амплитуды рассеяния (203).		Звуковые колебания в ферми-системе («нулевой звук») (265).	
Глава 5		Плазменные колебания.	
Методы задачи многих тел	206	Экранировка заряда в плазме (267).	
1. Метод квазичастиц и функции Грина	212	Законы сохранения и заряды квазичастиц для различных полей (268).	
Амплитуды перехода (212).		Глава 6	
Одночастичные функции Грина в системе невзаимодействующих частиц (функции Грина квазичастиц) (215).		Качественные методы в квантовой теории поля	273
Функции Грина в системе взаимодействующих частиц (217).		1. Конструирование релятивистских уравнений	280
Аналитические свойства одночастичной функции Грина (219).		Лоренц-инвариантность (280).	
Вычисление наблюдаемых величин (222).		Уравнения Максвелла (284).	
Распределение ферми-частиц по импульсам (224).		Уравнение Клейна — Гордона — Фока (286).	
		Уравнение Дирака (287).	
		Функция Грина бесспиновых частиц (290).	

Функция Грина частицы со спином $1/2$ (292).	
Функция Грина фотона (294).	
2. Расходимости и перенормируемость	297
Локальное взаимодействие между частицами (297).	
Графики Фейнмана в скалярной теории (300).	
Оценки расходимостей и идея перенормировок (302).	
Условие перенормируемости (307).	
Логарифмическое приближение и перенормируемость (310).	
3. Квантовая электродинамика на	318

малых расстояниях
Локальное взаимодействие в квантовой электродинамике (318).
Поляризация вакуума (322).
Радиационные поправки к закону Кулона (324).
Электромагнитное взаимодействие на сверхмалых расстояниях (327).

ПРЕДИСЛОВИЕ

Решение большинства задач теоретической физики начинается с применения качественных методов, которые составляют наиболее привлекательную и красивую особенность этой науки. Под качественными методами мы понимаем размерные оценки и оценки с помощью простых моделей, изучение предельных случаев, когда может быть использована малость какого-либо параметра, использование аналитических свойств физических величин и, наконец, извлечение следствий из свойств симметрии, т. е. из инвариантности относительно каких-либо преобразований, например, инвариантности относительно преобразований Лоренца или изотопической инвариантности.

Как показывает педагогический опыт, именно эта сторона теоретической физики труднее всего дается начинающим.

К сожалению, обычно методы теоретической физики излагаются формально математически, а не в той конструктивной форме, в какой ими пользуются в научной работе. Задача книги — восполнить этот пробел, т. е. научить начинающего физика-теоретика правильному подходу к решению научных задач. Эта цель в значительной мере определяет характер изложения. Все общие результаты получаются сначала на частных примерах, на упрощенных до предела моделях.

Формальное изложение, при котором убраны все следы постепенного подхода к результату, все следы «пота», может, как нам кажется, внушить начинающему научному работнику чувство неполноценности. Поэтому автор старался по возможности показать механизм подхода к задаче, особенно на первой стадии работы. Разумеется, при этом приходится отказаться от строгости изложения, но зато раскрываются «секреты» ремесла, т. е. маленькие хитрости, которые ускоряют получение результатов.

Обычная ошибка начинающих — это желание сразу понимать все до конца. В действительности понимание возникает постепенно по мере привыкания к новым понятиям. Одна из трудностей научной работы состоит в том, что нельзя продвигаться вперед без ясного понимания, но понимание возникает только в результате работы. Каждое законченное исследование означает преодоление этого противоречия. Аналогичные трудности неизбежно возникнут при чтении этой книги. Автор надеется, что к концу чтения они будут преодолены.

Каждая из шести глав книги начинается с подробного введения, в котором в простой форме излагается физический смысл полученных в главе результатов.

Первые три главы книги посвящены размерным и модельным оценкам в атомной механике, применениям различных типов теории возмущений и квазиклассическому приближению. Эти главы представляют собой в переработанном виде книгу А. Б. Мигдала и В. П. Крайнова «Приближенные методы квантовой механики» («Наука», 1966 г.).

Четвертая глава посвящена различным задачам, для решения которых необходимо использовать аналитические свойства физических величин.

В пятой главе развивается графический метод и его применение к задаче многих тел.

Наконец, шестая глава посвящена вопросам, связанным со взаимодействием элементарных частиц на малых расстояниях. Именно в этой проблеме квантовой теории поля главную роль играет применение качественных методов.

Автор выражает глубокую благодарность А. А. Мигдалу, А. М. Полякову, В. А. Ходелю за многочисленные советы и обсуждения и В. П. Крайнову за помощь в выборе материала первых трех глав. Автор благодарит также своих друзей и учеников Г. Засецкого, Д. Воскресенского, Н. Кириченко, О. Маркина, И. Мишустина, Г. Сорокина и А. Черноуцана за помощь в подготовке рукописи.

РАЗМЕРНЫЕ И МОДЕЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ

Ни одна задача в физике не решается точно. Всегда приходится пренебрегать влиянием каких-либо воздействий, которые не существенны для изучаемого явления. При этом нужно уметь оценивать отбрасываемые величины. Кроме того, следует до получения количественного результата исследовать изучаемое явление качественно, т. е. оценить порядок изучаемой величины и по возможности найти характер решения.

Для этой цели задача сначала рассматривается в максимально упрощенном виде. Например, если речь идет о движении частицы в кулоновском поле, то вместо этого рассматривается ее движение в прямоугольной потенциальной яме, с соответствующим образом подобранной глубиной и шириной, зависящей от энергии частицы, и т. д. Кроме того, следует рассмотреть все предельные случаи, в которых решение упрощается. Например, если требуется решить задачу о рассеянии частиц произвольной энергии, следует рассмотреть сначала предельные случаи малых и больших энергий и проследить, как сопрягаются соответствующие выражения в промежуточной области энергий.

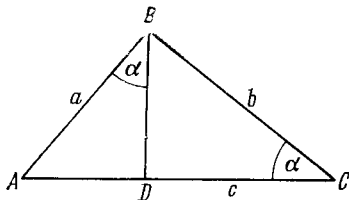


Рис. 1.

Цель этой главы — научить читателя получать приближенные решения из размерных оценок с помощью упрощенной модели изучаемого явления.

В некоторых случаях размерные оценки позволяют получить и количественные соотношения. Докажем, например, теорему Пифагора из размерных соображений.

Из размерности вытекает, что площадь треугольника (рис. 1) можно записать как квадрат гипотенузы c^2 ,

умноженный на некоторую функцию угла $f(\alpha)$. То же самое относится к площадям двух подобных треугольников ABD и BCD , для которых роль гипотенузы играют катеты исходного треугольника. Поэтому

$$c^2 f(\alpha) = a^2 f(\alpha) + b^2 f(\alpha).$$

Рассмотрим в виде другого примера задачу о нахождении силы сопротивления при движении тела в вязкой среде с произвольной скоростью.

Начнем с предельного случая малых скоростей. Тогда сила сопротивления будет определяться вязкостью среды. Параметр, определяющий понятие малой или большой скорости, найдется, если составить из вязкости, плотности среды и размеров тела величину, имеющую размерность скорости. Предположим, что тело имеет приблизительно одинаковые размеры по всем направлениям. Тогда для оценок размеры тела можно характеризовать, как и в случае шара, одной длиной R . Из вязкости η , плотности ρ , длины R и скорости v можно составить только одну безразмерную комбинацию, называемую числом Рейнольдса

$$\text{Re} = \frac{vR}{\nu},$$

где $\nu = \eta/\rho$. Так как поток количества движения равен $\eta \nabla v$, то оценка силы, действующей на единицу поверхности, есть $P \sim \eta \frac{v}{R}$. Градиент скорости оценивается как $\nabla v \sim v/R$. Действительно, на поверхности тела скорость жидкости равна v , вдали от тела на расстояниях порядка R жидкость покоится, $\nabla v \sim \frac{\Delta v}{R} \sim \frac{v}{R}$. Если оценить поверхность тела как $S \sim 4\pi R^2$, то полная сила сопротивления

$$F \sim 4\pi\eta vR.$$

Заметим, что точное решение задачи для сферического тела дает в случае малой скорости

$$F = 6\pi\eta vR.$$

В случае произвольной скорости это выражение следует помножить на функцию от безразмерного параметра Re

$$F = 6\pi\eta vR \Phi\left(\frac{vR}{\nu}\right).$$

Рассмотрим теперь предельный случай очень больших скоростей. В этом случае сила сопротивления не зависит от вязкости и определяется количеством движения, которое сообщается за единицу времени столбу жидкости, находящемуся впереди тела с площадью основания, равной площади поперечного сечения тела

$$F \sim \pi R^2 \rho v^2.$$

Следовательно, при больших скоростях функция $\Phi(x) \sim \frac{1}{6}x$.

Грубо характер решения при всех скоростях определяется из интерполяционной формулы

$$F \sim 6\pi\eta v R \left(1 + \frac{1}{6} \frac{vR}{\nu}\right).$$

Согласно такой оценке переход от одного режима к другому должен был бы произойти при $Re \sim 6$. В действительности переход в турбулентный режим, когда сила сопротивления не зависит от вязкости, происходит при $Re \sim 100$. Мы сталкиваемся здесь со случаем, который довольно редко встречается — обычно переход от одного предельного случая к другому характеризуется значением соответствующего безразмерного параметра порядка единицы.

Другой пример, который мы приведем, относится к возможности построения теории, связывающей гравитацию и электродинамику. Такая теория, если бы она существовала, должна была бы определить значение безразмерного параметра, связывающего гравитационную постоянную g с величинами, характеризующими электромагнитные процессы, т. е. с зарядом электрона e и его массой m , скоростью света c и постоянной Планка $\hbar$. Из этих величин можно составить два безразмерных соотношения

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}, \quad \xi = \frac{gm^2}{\hbar c} = 2 \cdot 10^{-45}.$$

Как уже упоминалось, безразмерные параметры, которые возникают в результате решения уравнений, обычно оказываются порядка единицы. Поэтому величина ξ должна входить таким образом, чтобы получалось число порядка единицы, например,

$$\alpha \ln(1/\xi) \sim 1.$$

Именно в такой форме входят параметры α и ξ в оценки, которые дают надежду на установление связи между электродинамикой и гравитацией.

Приведем еще один пример того, как оценки помогают ориентироваться в сложных задачах. Ответим на вопрос: начиная с каких напряженностей полей $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$ уравнения Максвелла в пустоте сделаются нелинейными? Причина нелинейности уравнений связана с возмущением вакуума внешним полем. Составим величину, имеющую размерность поля, из величин, характеризующих вакуумные флуктуации электрон-позитронного поля. Так как $e\mathcal{E}$ имеет размерность энергии, деленной на длину, то

$$e\mathcal{E}_\kappa \sim mc^2 / \frac{\hbar}{mc}, \quad \mathcal{E}_\kappa \sim \frac{m^2 c^3}{e\hbar}.$$

Из этого выражения ясно, что критическое поле определяется частицами с наименьшей массой, т. е. электрон-позитронным полем. Величина $\mathcal{E}_\kappa$, как мы видим, есть напряженность, при которой на комптоновской длине возникает разность потенциалов порядка энергии пары. Подстановка численных значений e , m , $\hbar$, c дает $\mathcal{E}_\kappa \sim 10^{16}$ в/см.

1. ОЦЕНКИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ВЫРАЖЕНИЙ

Прежде чем производить оценки физических величин, посмотрим, как делать более простые оценки, а именно — оценки математических выражений. Принцип подобных оценок состоит в определении области переменных, вносящих главный вклад в результат, в выделении быстро и медленно меняющихся в этой области частей математического выражения, а также в использовании асимптотических выражений.

Оценка производной. В самом простом случае, когда существенная область изменения функции $F(x)$ характеризуется одним параметром l , производная имеет порядок $F'(x) \sim F(l)/l$.

Например, если $F(x) = \exp(-x^2/l^2)$, то производная $F'(x) = -\frac{2x}{l^2} \exp(-x^2/l^2)$ и, следовательно, $F'(l) \sim F(l)/l$.

Однако для x , много больших l , такая оценка не годится.

Для степенной функции $F(x) = x^n$ область существенного изменения определяется самой переменной x . Действительно,

$$F'(x) = nx^{n-1} \sim nF(x)/x.$$

В некоторых случаях существенная длина l различна на различных участках изменения переменной x . Тогда

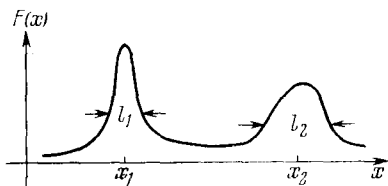


Рис. 2.

в каждой области переменной x производная

$$F'(x) \sim F(x)/l(x),$$

где $l(x)$ — длина, на которой $F(x)$ существенно меняется в этой области. Пусть, например, $F(x)$ имеет вид, изображенный на рис. 2. Тогда

$$F'(x - x_1) \sim F(x_1)/l_1, \quad \text{а} \quad F'(x - x_2) \sim F(x_2)/l_2.$$

В более сложных случаях, когда $F(x)$ можно хотя бы примерно нарисовать, ее производную лучше всего оценивать из графика.

Оценки интегралов. Продемонстрируем методы оценок интегралов на нескольких примерах.

1. Часто можно получать приближенные значения интегралов, разлагая в ряд подинтегральную функцию. Например,

$$\begin{aligned} \int_0^x \exp(-t^2) dt &= \int_0^x (1 - t^2 + t^4/2 - \dots) dt = \\ &= x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \dots \end{aligned}$$

Этот ряд сходится для всех x . Для оценки интеграла можно ограничиться несколькими первыми членами ряда. Разумеется, такая оценка удобна при $x \lesssim 1$.

Как оценить тот же интеграл при больших x ? Интегрируя несколько раз по частям, получаем

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} &= \int_0^{\infty} - \int_x^{\infty} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \left[\frac{\exp(-x^2)}{2x} - \int_x^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{2t^2} dt \right] = \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \exp(-x^2) \left[\frac{1}{2x} - \frac{1}{4x^3} + \dots \right]; \end{aligned}$$

где n -й член ряда имеет вид $(-1)^n (2n-1)!!/2^{n+1}x^{2n+1}$. Легко видеть, что ряд расходится. Действительно, при $n \rightarrow \infty$ факториал $(2n-1)!!$ растет быстрее степенного члена x^{2n+1} .

Рассматриваемый ряд представляет собой пример так называемого асимптотического ряда (подробнее см. стр. 124). Так как он расходится, то брать очень большое число членов для оценки интеграла невыгодно: при этом уменьшится точность. Как найти оптимальное число членов ряда? Заметим, что при больших x члены рассматриваемого ряда сначала убывают по абсолютной величине, а затем начинают расти. Оптимальное число членов ряда, очевидно, определяется из условия минимума остаточного члена ряда. Легко видеть, что остаточный член имеет порядок $(n+1)$ -го члена ряда. Поэтому рецепт состоит в суммировании до минимального члена ряда. Условие минимума можно приближенно записать в форме равенства n -го и $(n+1)$ -го членов ряда:

$$\frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}x^{2n+1}} \sim \frac{(2n+1)!!}{2^{n+2}x^{2n+3}}.$$

Отсюда $n \sim x^2$.

ЗАДАЧА

Показать, что при оценке интеграла $\int_x^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t} dt$

в случае $x \gg 1$ оптимальное число членов асимптотического ряда равно x .

2. Многие интегралы можно оценить, выделяя наиболее существенную часть в подинтегральном выражении. Рассмотрим примеры:

$$1) \quad I(x) = \int_0^x \frac{\exp(t^2)}{\sqrt{x^2 - t^2}} dt.$$

Если $x \ll 1$, то в подинтегральном выражении экспонента $\exp(t^2) \approx 1$.

Следовательно, $I(x) \approx \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{x^2 - t^2}} = \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{1 - z^2}}$. Так как в этом интеграле нет никаких параметров, то $I(x) \sim 1$.

Вычисление этого интеграла дает $\int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{1 - z^2}} = \frac{\pi}{2}$.

Если $x \gg 1$, то из-за экспоненциального роста множителя $\exp(t^2)$ главный вклад в интеграл внесет область около точки $t = x$. Обозначим $\xi = x - t$. Тогда

$$I(x) = \int_0^x \exp(x^2 - 2\xi x + \xi^2) \frac{d\xi}{\sqrt{2\xi x - \xi^2}}.$$

Область ξ , существенная в подинтегральном выражении, сосредоточена около нижнего предела и имеет ширину порядка $1/2x$. В этой области $\xi^2 \sim 1/4x^2 \ll 1$, следовательно, $\exp(\xi^2) \approx 1$ и

$$I(x) \approx \exp(x^2) \int_0^x e^{-2\xi x} \frac{d\xi}{\sqrt{2\xi x}} \approx \frac{\exp(x^2)}{2x} \int_0^\infty e^{-z} \frac{dz}{\sqrt{z}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2x} \exp(x^2).$$

При $x \sim 1$ оба выражения для $I(x)$, как это и должно быть, примерно совпадают и порядка единицы. Таким образом, указанные оценки хорошо описывают $I(x)$ во всей области изменения x .

$$2) \quad I(\alpha, \beta) = \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} \sin^2 \beta x \, dx, \quad \alpha > 0.$$

Перепишем этот интеграл в виде

$$I(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \int_0^\infty e^{-z^2} \sin^2 \left(\frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z \right) dz.$$

При $z > 1$ подинтегральная функция быстро убывает, поэтому существенная область интегрирования $0 < z < 1$.

Если $\beta \gg \sqrt{\alpha}$, то $\sin \left(\frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z \right)$ много раз осциллирует в су-

щественной области значений z . Следовательно, $\sin^2\left(\frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z\right)$ можно заменить на $1/2$, и тогда интеграл $I(\alpha, \beta)$ приближенно равен

$$I(\alpha, \beta) \approx \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} \int_0^{\infty} e^{-z^2} dz = \frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{\alpha}}.$$

Если $\beta \ll \sqrt{\alpha}$, то в существенной области значений z $\sin\left(\frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z\right) \approx \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z$. Следовательно,

$$I(\alpha, \beta) \approx \frac{\beta^2}{\alpha^{3/2}} \int_0^{\infty} e^{-z^2} z^2 dz = \frac{\sqrt{\pi} \beta^2}{4\alpha^{3/2}}.$$

При $\beta = \sqrt{\alpha}$ оба выражения для $I(\alpha, \beta)$ совпадают и равны $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$.

Заметим, что точное значение оцениваемого интеграла равно

$$I(\alpha, \beta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} (1 - \exp(-\beta^2/\alpha)).$$

Легко видеть, что из него получаются оба предельных случая $\beta \gg \sqrt{\alpha}$ и $\beta \ll \sqrt{\alpha}$, приведенные выше. При $\beta = \sqrt{\alpha}$

$$I(\alpha, \beta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \left(1 - \frac{1}{e}\right),$$

т. е. того же порядка, что и приведенные оценки.

3) $I(\alpha, a) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha x}}{x+a} dx$, $a, \alpha > 0$. Заменим переменную интегрирования: $x = az$. Тогда $I(\alpha, a)$ принимает вид

$$I = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\beta z}}{z+1} dz,$$

где $\beta = \alpha a$. Область, где подинтегральная функция существенно отлична от нуля, $z \lesssim 1/\beta$.

Пусть $\beta \gg 1$. Тогда в существенной области $z \ll 1$. Следовательно,

$$I \approx \int_{\beta \gg 1}^{\infty} e^{-\beta z} dz = \frac{1}{\beta}. \quad (1.1)$$

Если $\beta \ll 1$, то в существенной области $z \gg 1$. Следовательно,

$$I \approx \int_{\beta \ll 1}^{1/\beta} \frac{dz}{z} = \ln \frac{1}{\beta}. \quad (1.2)$$

Рассматриваемый интеграл выражается через интегральную показательную функцию $Ei(x)$ [1]:

$$\int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha x}}{x+a} dx = -e^{\beta} Ei(-\beta), \quad \beta = \alpha a.$$

Если $\beta \gg 1$, то $Ei(-\beta) \approx e^{-\beta}/(-\beta)$, и мы получаем формулу (1.1). Если $\beta \ll 1$, то $Ei(-\beta) \approx -\ln \beta$, что совпадает с (1.2).

4) $I(a) = \int_{-1}^1 \frac{f(x) dx}{\sqrt{x^2 + a^2}}$; предполагается, что функция $f(x)$ существенно меняется в области $x \sim 1$.

В случае $a \ll 1$ основной вклад в интеграл вносит область в окрестности начала координат. Вынесем плавную в этой области функцию $f(x)$ из-под знака интеграла, заменив ее на $f(0)$. Тогда

$$\begin{aligned} I(a) &\approx f(0) \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{x^2 + a^2}} = 2f(0) \ln \frac{1 + \sqrt{1 + a^2}}{a} \approx \\ &\approx 2f(0) \ln \frac{1}{a}. \end{aligned}$$

В случае $a \gg 1$ получим

$$I(a) \approx \frac{1}{a} \int_{-1}^1 f(x) dx.$$

ЗАДАЧИ

Оценить следующие интегралы в предельных случаях $a \gg b$ и $a \ll b$:

$$1) \int_0^{\infty} e^{-bx^2} \sin ax^2 dx, \quad b > 0.$$

$$2) \int_0^{\infty} \exp(-x/a) \frac{dx}{\sqrt{x(x+b)}}, \quad a, b > 0.$$

$$3) \int_0^{\infty} \frac{\sin(x/a)}{x(x^2+b^2)} dx, \quad a, b > 0.$$

ОТВЕТЫ.

1) $a \gg b$: $\sqrt{\pi/8a}$; $a \ll b$: $a\sqrt{\pi/16b^3}$. Точное значение интеграла равно

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a^2+b^2}} \sin\left(\frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{a}{b}\right).$$

2) $a \gg b$: $\ln(a/b)$; $a \ll b$: $\sqrt{\pi a/b}$. Точное значение интеграла равно

$$\exp(b/2a) \cdot K_0(b/2a)$$

(K_0 — функция Макдональда).

3) $a \gg b$: $\pi/2ab$; $a \ll b$: $\pi/2b^2$. Точное значение интеграла равно

$$\frac{\pi}{2b^2} [1 - \exp(-b/a)].$$

Метод перевала*). Рассмотрим интеграл $I = \int_0^{\infty} g(t) e^{f(t)} dt$,

где $f(t)$ — функция, которая имеет резкий максимум при $t = t_0 > 0$.

Пусть вблизи точки t_0 функция $g(t)$ меняется медленно. Тогда в окрестности максимума функцию ge^f можно заменить более простой функцией. Для этого разложим f в ряд Тейлора в окрестности ее максимума t_0 :

$$f(t) = f(t_0) + \frac{1}{2} (t - t_0)^2 f''(t_0) + \dots$$

*) Более подробно метод перевала рассматривается в гл. III (стр. 137).

Предположим, что $|f''(t_0)| \gg 1/t_0^2$. Это — математическое выражение предположения о резком максимуме функции f . Действительно, существенные в интеграле I значения $(t - t_0)^2$, как мы увидим ниже (1.3), имеют порядок $1/f''(t_0)$. Таким образом, $(t - t_0)^2/t_0^2 \ll 1$. Это условие делает законным отбрасывание следующих членов в написанном выше ряде Тейлора для $f(t)$.

Имеем

$$I \approx g(t_0) \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[f(t_0) - \frac{1}{2}(t - t_0)^2 |f''(t_0)| \right] dt = \\ = \sqrt{\frac{2\pi}{|f''(t_0)|}} g(t_0) e^{f(t_0)}. \quad (1.3)$$

Пределы интегрирования заменены здесь на $[-\infty, \infty]$, так как подинтегральное выражение экспоненциально затухает в области

$$\delta t > \frac{1}{\sqrt{|f''(t_0)|}} \ll t_0.$$

Оценим поправку, вносимую следующими членами ряда Тейлора.

Если ограничиться только кубическим членом и разлагать экспоненту по нему в ряд, то первый член разложения не вносит вклада из-за нечетности подинтегрального выражения. По этой причине рассмотрим член четвертого порядка в ряде Тейлора для f . Он равен $\frac{(t - t_0)^4}{4!} f^{(IV)}(t_0)$. Разлагая далее экспоненту по нему в ряд, находим, что поправочный член по отношению к (1.3) имеет оценку $f^{(IV)}/(f'')^2$. Если функция $f(t)$ характеризуется только одним параметром, то, оценивая производные от f , находим:

$$f^{(IV)}/(f'')^2 \sim 1/f(t_0).$$

Таким образом, метод перевала применим при условии $f(t_0) \gg 1$. Оно эквивалентно сделанному выше предположению $|f''(t_0)| \gg 1/t_0^2$.

Если заменить в (1.3) $t - t_0$ на $i\xi$, то подинтегральное выражение превратится в растущую экспоненту. Иными

словами, в комплексной плоскости переменной t точка t_0 является седловой (рис. 3). Направление интегрирования совпадает с направлением наискорейшего спуска с перевала. Отсюда понятно название метода перевала.

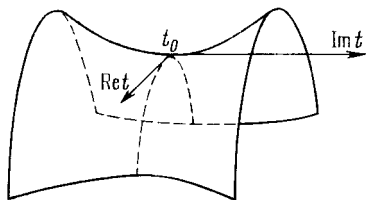


Рис. 3.

Мы рассмотрели частный случай, когда направление перевала совпадает с вещественной осью. Можно рассмотреть и более общий случай, когда направление перевала составляет произвольный угол с вещественной осью.

С помощью метода перевала получим асимптотическое выражение при больших x гамма-функции

$$\Gamma(x+1) = \int_0^{\infty} \exp(-t + x \ln t) dt.$$

Обозначим $f(t) = -t + x \ln t$. Тогда из равенства нулю $f'(t)$ можно найти точку перевала t_0 :

$$f'(t_0) = -1 + \frac{x}{t_0} = 0,$$

откуда $t_0 = x$. Так как $f(t_0) = x \ln x - x$, то условие применимости метода перевала $f(x) \gg 1$ означает $x \gg 1$.

Имеем $f''(t_0) = -x/t_0^2 = -1/x$. С помощью (1.3) находим

$$\Gamma(x+1) \approx \sqrt{2\pi x} (x/e)^x. \quad (1.4)$$

$x \gg 1$

Эта асимптотическая формула называется формулой Стирлинга.

Для оценки ее точности воспользуемся соотношением $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$. Запишем искомое точное выражение для $\Gamma(x+1)$ в виде:

$$\Gamma(x+1) = \sqrt{2\pi x} \left(\frac{x}{e}\right)^x [1 + \phi(x+1)],$$

где φ — пока неизвестная функция. С помощью рекуррентного соотношения получаем $\varphi(x+1) - \varphi(x) = -\frac{1}{12x^2}$. При $x \gg 1$ разность $\varphi(x+1) - \varphi(x)$ приближенно равна $\varphi'(x)$ и, следовательно, $\varphi(x) = \frac{1}{12x}$.

Итак, при $x \gg 1$

$$\Gamma(x+1) \approx \sqrt{2\pi x} \left(\frac{x}{e}\right)^x \left[1 + \frac{1}{12x} + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right].$$

Интересно, что эта формула с большой точностью годится и для небольших значений x . Ее точность можно проверить, зная, что для целых значений x гамма-функция $\Gamma(x+1) = x!$. Например, даже для $x = 1$ получаем

$$\sqrt{2\pi} \frac{1}{e} \left(1 + \frac{1}{12}\right) = 0,9990 \approx 1! = 1,$$

при $x = 2$

$$\sqrt{4\pi} \frac{1}{e^2} \left(1 + \frac{1}{24}\right) = 1,9990 \approx 2! = 2.$$

ЗАДАЧИ

1. Вычислить интеграл $\int_0^\infty \cos\left(\frac{1}{3}t^3 + xt\right) dt$ методом перевала при $x \gg 1$.

2. Вычислить интеграл $\int_0^\infty x \exp\left(-ax - \frac{b}{\sqrt{x}}\right) dx$. Показать, что метод перевала годится при условии $ab^2 \gg 1$.

О т в е т ы.

$$1. \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt[4]{x}} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right).$$

$$2. \frac{b}{a} \sqrt{\frac{\pi}{3a}} \exp\left(-\frac{3}{2}\sqrt[3]{2ab^2}\right).$$

Свойства интегралов от осциллирующих функций. Оценки далеких членов ряда Фурье. Рассмотрим несколько примеров, поясняющих свойства интегралов от осциллирующих функций.

$$1) \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t} dt}{V \sqrt{1+t^2}}, \quad \omega \gg 1.$$

Особые точки подинтегрального выражения находятся на мнимой оси: $t = \pm i$. Вычислим этот интеграл, смещая контур интегрирования в верхнюю полуплоскость (см. рис. 4). Интегралы по C_1 и C_2 исчезают при смещении

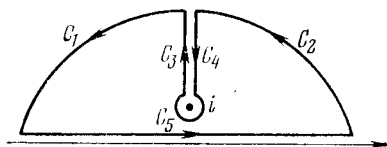


Рис. 4.

контура в бесконечность. Поэтому рассматриваемый интеграл равен интегралу по контуру $C_3 + C_4 + C_5$ вокруг точки ветвления $t = i$. Знаменатель подинтегрального выражения меняет знак при обходе

точки ветвления. Поэтому интегралы по C_3 и C_4 равны. Интеграл по контуру C_5 стремится к нулю. В этом легко убедиться, заменив $t = i + re^{i\varphi}$, причем $r \rightarrow 0$. Тогда

$$\int_{C_5} \sim \int_0^{2\pi} \frac{re^{i\varphi} d\varphi}{V re^{i\varphi}} \sim V r \rightarrow 0.$$

Вводя переменную интегрирования $t = i(1+y)$ и вычисляя интеграл по C_3 , находим:

$$I \simeq 2e^{-\omega} \int_0^{\infty} e^{-\omega y} \frac{dy}{V 2y} = V \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} e^{-\omega}.$$

Таким образом, при больших ω интеграл I экспоненциально мал.

$$2) \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t} dt}{V (a^2 + t^2) (b^2 + t^2)}, \quad \omega \rightarrow \infty.$$

В этом случае в верхней полуплоскости имеются две точки ветвления $t = ia$ и $t = ib$. Предположим, что $a > b$. Прежде всего можно уменьшить число свободных параметров в I . Измеряя t , a , ω и I в единицах b , получим

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{dt}{V (a^2 + t^2) (1 + t^2)}.$$

Сместим контур интегрирования в верхнюю полуплоскость (рис. 5). На рис. 5 от точки i до точки ia проведен разрез. Аналогично рассмотрению предыдущего примера, легко видеть, что искомый интеграл равен удвоенному интегралу вдоль разреза.

Заменяя переменную интегрирования $t = i(1 + y)$, имеем:

$$I \simeq 2e^{-\omega} \int_0^{a-1} \frac{e^{-\omega y} dy}{\sqrt{2y(a^2 - 1 - 2y)}}.$$

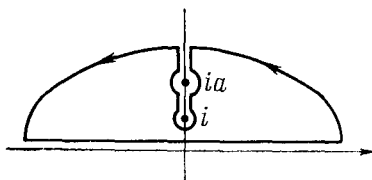


Рис. 5.

При вычислении этого интеграла возможны два случая. Если $a - 1 \gg 1/\omega$, то существенная область интегрирования обрезается экспонентой $e^{-\omega y}$ и имеет порядок $1/\omega$. Следовательно,

$$I \simeq 2e^{-\omega} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\omega y} dy}{\sqrt{2y(a^2 - 1)}} = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega(a^2 - 1)}} e^{-\omega}.$$

Если $a - 1 \ll 1/\omega$, то внутри интервала интегрирования $e^{-\omega y} \approx 1$ и

$$I \simeq 2e^{-\omega} \int_0^{a-1} \frac{dy}{\sqrt{2y(a^2 - 1 - 2y)}} = 2e^{-\omega} \arcsin \sqrt{\frac{2}{a+1}}.$$

Первый случай соответствует далеким друг от друга, второй — близким особым точкам. Мы видим, что в обоих случаях экспоненциально малый член определяется особой точкой, ближайшей к вещественной оси, а предэкспонента существенно зависит от расположения обеих особых точек.

Отметим, что в пределе $a \rightarrow 1$ из последнего выражения получаем $I \rightarrow \pi e^{-\omega}$. Этот результат легко получить сразу, если учесть, что при $a \rightarrow 1$ слияние корневых точек ветвления приводит к простому полюсу.

$$3) I = \int_{-1}^1 f(x) e^{i\omega x} dx.$$

Этот интеграл возникает при вычислении амплитуды рассеяния (см. 2.1). Пределы интегрирования здесь

конечны. Интегрируя по частям, получим:

$$I = f(x) \frac{e^{i\omega x}}{i\omega} \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{i\omega} \int_{-1}^1 f'(x) e^{i\omega x} dx = \\ = \frac{f(1) e^{i\omega} - f(-1) e^{-i\omega}}{i\omega} + O\left(\frac{1}{\omega^2}\right).$$

Итак, в случае конечных пределов далекие фурье-компоненты имеют, как правило, степенную малость (вместо экспоненциальной малости в случае бесконечных пределов). Исключение составляет случай, когда при многократном интегрировании по частям вклад от $f(x)$ и всех ее производных обращается в ноль на границах интегрирования.

4) $I = \int g(r) \exp[i(kr - kr)] dr$ при $kR \gg 1$, где R — характерное расстояние, на котором изменяется функция $g(r)$.

Выделим в I интегрирование по угловым переменным:

$$I = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi g(r, \theta, \varphi) e^{ikr(1-\cos\theta)} \sin\theta d\theta d\varphi.$$

Интегрируя по частям, получаем

$$I = \int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{ikr} \left[g(r, \theta, \varphi) e^{ikr(1-\cos\theta)} \Big|_0^\pi + O\left(\frac{1}{kR}\right) \right] d\varphi.$$

Вкладом от верхнего предела можно пренебречь из-за быстрой осцилляции подинтегрального выражения. Окончательно находим

$$I \approx \frac{2\pi i}{k} \int_0^\infty g(r, \theta = 0) r dr \left[1 + O\left(\frac{1}{kR}\right) \right].$$

Эти результаты можно обобщить: далекие фурье-компоненты функций, не имеющих особенностей на вещественной оси, экспоненциально малы. Если x_1 — расстояние от вещественной оси до ближайшей особой точки $f(x)$, то

$$f_\omega = \int_{-\infty}^\infty f(x) e^{i\omega x} dx \sim e^{-\omega x_1}.$$

Оценим предэкспоненциальный множитель для фурье-компоненты f_ω . Если $f(x)$ имеет полюс в комплексной плоскости ω , то

$$f_\omega \sim f(x_1)x_1 e^{-\omega x_1}.$$

Действительно, вычет C_1 функции f в точке полюса, как видно из размерности, имеет порядок $C_1 \sim f(x_1)x_1$. Если $f(x)$ имеет точку ветвления корневого типа и не имеет близко других особых точек, то, как мы видели на первом и втором примерах (стр. 22)

$$f_\omega \sim \frac{f(x_1)x_1}{V\omega x_1} e^{-\omega x_1}.$$

В случае конечных пределов интегрированием по частям получаем

$$f_\omega = \int_{a_1}^{a_2} f(x) e^{i\omega x} dx \underset{\omega \rightarrow \infty}{\sim} \frac{f(a_1)}{\omega} \left[1 + O\left(\frac{1}{\omega}\right) \right].$$

То же самое относится к интегралам в бесконечных пределах, когда $f(x)$ имеет скачки на вещественной оси. Действительно, интеграл можно разбить на области от $-\infty$ до места скачка ($x=a$) и от места скачка до ∞ . Если вычислять затем каждый из этих интегралов, то, как и в только что приведенном примере, возникает степенная малость. В этом случае

$$f_\omega \approx i \frac{\Delta f}{\omega},$$

где Δf — величина скачка.

Легко видеть, что если скачок имеет n -я производная функции $f(x)$, то

$$f_\omega \approx \frac{\Delta f^{(n)}}{(-i\omega)^{n+1}},$$

где $\Delta f^{(n)}$ — величина скачка функции $f^{(n)}(x)$. Чтобы убедиться в этом, нужно проинтегрировать по частям $(n+1)$ раз величину

$$f_\omega = \int_{-\infty}^a f(x) e^{i\omega x} dx + \int_a^\infty f(x) e^{i\omega x} dx.$$

5) Для иллюстрации этих результатов рассмотрим пример, на котором будет видно, как в далеких компонентах Фурье экспоненциальная малость превращается в степенную, когда особенность функции приближается к вещественной оси. Именно, рассмотрим интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega x}}{1 + e^{\alpha x}} dx, \quad \omega = \omega_0 - i\delta, \quad \alpha, \delta > 0, \quad \delta \rightarrow 0.$$

При таком выборе знака δ интеграл сходится; после его вычисления можно устремить δ к 0.

График функции $f(x) = [1 + e^{\alpha x}]^{-1}$ имеет вид, изображенный на рис. 6. Если $\alpha \rightarrow \infty$, то эта функция стремится к прямоугольной ступеньке. Функция $f(x)$ имеет

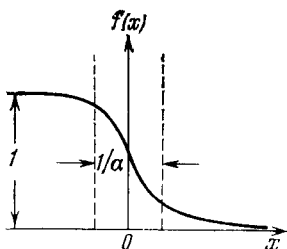


Рис. 6.

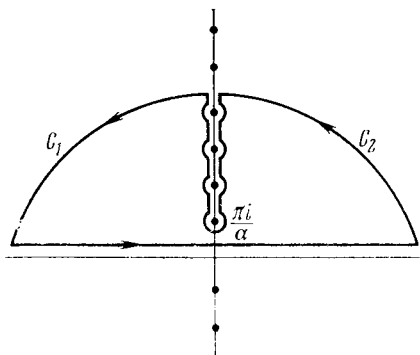


Рис. 7.

простые полюса в точках $x_k = \frac{(2k+1)\pi i}{\alpha}$, где k — целое число. Если $\alpha \rightarrow \infty$, то полюса приближаются к вещественной оси.

Вычислим интеграл, смещая контур интегрирования в верхнюю полуплоскость (рис. 7). Интеграл по $(C_1 + C_2)$ обращается в нуль при смещении контура в бесконечность. Итак, рассматриваемый интеграл сводится к сумме вычетов в полюсах верхней полуплоскости. Для нахождения вычета разложим $e^{\alpha x}$ в ряд вблизи полюса x_k :

$$e^{\alpha x} = -1 - \alpha(x - x_k).$$

Тогда

$$I = \sum_{k=0}^{\infty} \oint e^{i\omega x} \frac{dx}{-\alpha(x-x_k)} = \\ = -\frac{2\pi i}{\alpha} \exp\left(-\frac{\pi\omega}{\alpha}\right) [1 + e^{-2\pi\omega/\alpha} + e^{-4\pi\omega/\alpha} + \dots].$$

Ряд в квадратных скобках представляет собой геометрическую прогрессию и его сумма равна $[1 - \exp(-2\pi\omega/\alpha)]^{-1}$. Следовательно,

$$I = -\pi i/\alpha \operatorname{sh} \frac{\pi\omega}{\alpha}.$$

Если $\omega/\alpha \gg 1$, то рассматриваемый интеграл экспоненциально мал:

$$I \approx -\frac{2\pi i}{\alpha} e^{-\pi\omega/\alpha}.$$

$\omega/\alpha \gg 1$

Это соответствует сделанному выше утверждению об экспоненциальной малости далеких фурье-компонент в случае, когда подинтегральная функция не имеет особенностей на вещественной оси.

Если $\alpha \rightarrow \infty$, то

$$I \approx -\frac{i}{\omega}.$$

$\omega/\alpha \ll 1$

Итак, когда особенность переходит на вещественную ось, фурье-компонента становится малой степенным образом.

ЗАДАЧА

Оценить далекую компоненту фурье-функции $f(x) = xe^{-|x|}$. Она встретится при рассмотрении дипольного фотоэффекта (стр. 54).

О т в е т.

$$f_{\omega} \approx \frac{2i}{\omega^3}.$$

$\omega \rightarrow \infty$

Оценки решений дифференциальных уравнений. Приведем несколько случаев качественного решения дифференциальных уравнений.

1. Квазиклассическое приближение (этот метод будет подробно рассмотрен ниже, в 3.1).

При рассмотрении многих задач теоретической физики требуется решить дифференциальное уравнение вида

$$\varphi'' + k^2(x)\varphi = 0. \quad (1.5)$$

Характер решения уравнения (1.5) существенно зависит от знака k^2 . Действительно, если k^2 — положительная величина, то решение имеет осциллирующий характер,

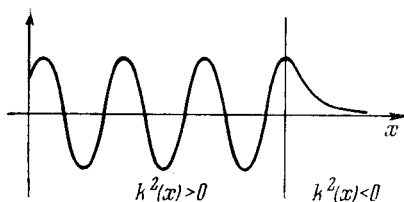


Рис. 8.

например, для $k = \text{const}$ $\varphi = \exp(\pm ikx)$. Если $k^2 < 0$, то решение экспоненциально растет или затухает; $\varphi = \exp(\pm |k|x)$ при $k = \text{const}$. Решение уравнения (1.5) имеет такой же характер и когда k зависит от x (рис. 8).

Если $k^2(x)$ для интересующих нас x — большое положительное число, то приближенное решение уравнения (1.5) имеет вид

$$\varphi = f(x) \exp \left\{ \pm i \int k(x) dx \right\}, \quad (1.6)$$

где $f(x)$ — медленно изменяющаяся функция. Действительно, в этом случае $\varphi' \approx \pm ik(x)\varphi$ и $\varphi'' \approx -k^2(x)\varphi$. Если $k(x)$ — достаточно гладкая функция x , то решение (1.6) приближенно удовлетворяет уравнению (1.5). Можно найти и следующую поправку (подробнее см. 3.1). Так как $\varphi' = \frac{f'}{f}\varphi \pm ik\varphi$ и $\varphi'' \approx -k^2\varphi \pm ik'\varphi \pm 2ik\frac{f'}{f}\varphi$, то, подставляя φ и φ'' в (1.5), находим $2kf' + fk' = 0$ или $f'/f = -k'/2k$, откуда $f \sim 1/\sqrt{k}$.

Итак, приближенное решение уравнения (1.5) имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi &\approx \frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left\{ \pm i \int k(x) dx \right\}, \quad k^2 > 0, \\ \varphi &\approx \frac{1}{\sqrt{|k|}} \exp \left\{ \pm \int |k(x)| dx \right\}, \quad k^2 < 0. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Рассмотрим примеры.

1) $\varphi'' + \alpha x \varphi = 0$ — уравнение для так называемой функции Эйри.

Исследуем сначала случай $x > 0$. Тогда $k^2 = \alpha x > 0$ и согласно (1.7) решение при больших x имеет вид

$$\varphi \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt[4]{\alpha x}} \exp \left[\pm \frac{2}{3} i \sqrt{\alpha x^3} \right]. \quad (1.8)$$

Решение при $x < 0$ можно получить аналитическим продолжением (1.8) (подробнее об этом см. 3.1)

$$\varphi \underset{|x| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{e^{-\pi i/4}}{\sqrt[4]{\alpha |x|}} \exp \left[\pm \frac{2}{3} \sqrt{\alpha |x|^3} \right].$$

Дополнительная фаза $\exp(-\pi i/4)$ возникает при обходе точки ветвления $x = 0$.

2) $\varphi'' + (\alpha - \beta x^2)\varphi = 0$. Если $\beta x^2 \gg \alpha$, то $\int |k| dx \approx \approx \sqrt{\beta} \int x dx = \frac{1}{2} \sqrt{\beta} x^2$. Следовательно, асимптотическое решение при больших x имеет вид

$$\varphi \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt[4]{\beta x^2}} \exp \left[\pm \frac{1}{2} \sqrt{\beta} x^2 \right].$$

ЗАДАЧИ

1. Найти асимптотическую оценку решения уравнения $xu'' + (\gamma - x)u' - \alpha u = 0$ (вырожденное гипергеометрическое уравнение), приведя предварительно это уравнение к самосопряженному виду с помощью надлежащей замены переменной u .

2. С помощью квазиклассического приближения получить асимптотическое выражение ($x \gg 1$) функции Бесселя $J_n(x)$. Упростить его для случая $x \gg n$.

ОТВЕТЫ.

$$1. u \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} x^{\alpha-\gamma} e^x, \quad u \underset{x \rightarrow -\infty}{\sim} |x|^{-\alpha}.$$

$$2. J_n(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt[4]{x^2 - n^2}} \sin \left(\sqrt{x^2 - n^2} + n \arcsin \frac{n}{x} + C_n \right),$$

где C_n — константа, определяемая типом функции Бесселя.

При $x \gg n$ имеем $J_n(x) \sim \frac{1}{\sqrt{x}} \sin(x + C_n)$.

2. Приближенные решения дифференциальных уравнений можно получать, опуская в этих уравнениях малые члены и производя последовательные итерации.

Рассмотрим следующий пример:

$$y'' + y + \alpha y^3 = 0. \quad (1.9)$$

Будем искать решение в виде последовательных приближений по параметру α , предполагаемому малым. Решение невозмущенного уравнения $y^{(0)''} + y^{(0)} = 0$ имеет вид $y^{(0)} = a \sin(x + \varphi)$. Можно положить $\varphi = 0$, что соответствует сдвигу начала отсчета x . Если подставлять это решение в член αy^3 уравнения (1.9) и решать (1.9) непосредственно методом итерации, то встретится трудность. Действительно, в уравнении

$$y^{(1)''} + y^{(1)} = -\alpha y^{(0)3} = -\frac{\alpha a^3}{4}(3 \sin x - \sin 3x)$$

свободный член содержит собственное решение однородного уравнения. Это приводит к появлению фиктивного резонанса. Чтобы его устранить, нужно учесть, что возмущение αy^3 меняет частоту колебаний. Ищем нулевое решение в виде $y^{(0)} = a \sin \omega x$, где частота ω находится из условия отсутствия такого резонанса. Уравнение (1.9) удобно переписать в виде

$$y'' + \omega^2 y = -\alpha y^3 + (\omega^2 - 1)y. \quad (1.10)$$

Правую часть этого уравнения будем рассматривать как неоднородность. Подставляя $y^{(0)}$ в правую часть (1.10), получим

$$y^{(1)''} + \omega^2 y^{(1)} = -\frac{\alpha a^3}{4}(3 \sin \omega x - \sin 3\omega x) + (\omega^2 - 1)a \sin \omega x. \quad (1.11)$$

Потребуем, чтобы коэффициент при $\sin \omega x$ в правой части обращался в ноль. Отсюда получаем $\omega \approx 1 + 3\alpha a^2/8$.

Ищем частное решение неоднородного уравнения (1.11) в виде

$$y^{(1)} = \gamma \sin 3\omega x.$$

Подставляя это решение в (1.11), находим $\gamma = \alpha a^3/32$. Итак,

$$y \approx a \sin \omega x + \frac{\alpha a^3}{32} \sin 3\omega x,$$

где $\omega = 1 + 3\alpha a^2/8$. Условие применимости полученного

решения имеет вид $\alpha a^2 \ll 1$. При последующих итерациях мы получили бы для ω ряд по степеням параметра αa^2 , а для y — ряд, содержащий слагаемые вида $a (\alpha a^2)^k \sin (2k + 1)\omega x$.

3. Предположим, что решение известно в некоторых областях изменения переменной. В этом случае можно построить приближенные интерполяционные формулы для решения во всей области изменения переменной.

В качестве примера рассмотрим уравнение Томаса — Ферми:

$$\varphi'' = \frac{1}{\sqrt{x}} \varphi^{3/2}, \quad \varphi(0) = 1, \quad \varphi(\infty) = 0. \quad (1.12)$$

Оно возникает при нахождении самосогласованного поля атома в квазиклассическом приближении (см. 3.2).

Найдем приближенное решение уравнения (1.12) при $x \rightarrow \infty$. Будем искать его в виде $\varphi = A/x^\alpha$. Подставляя это решение в (1.12), получим

$$A\alpha(\alpha + 1)x^{-\alpha-2} = A^{3/2}x^{-(3\alpha+1)/2},$$

откуда $\alpha = 3$ и $A^{1/2} = \alpha(\alpha + 1)$, т. е. $A = 144$. Итак,

$$\varphi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{144}{x^3}.$$

Найдем поправку к этому решению при $x \rightarrow \infty$:

$$\varphi \approx \frac{144}{x^3} + \psi. \quad (1.13)$$

Подставим (1.13) в (1.12). В линейном по ψ приближении находим

$$\psi'' = \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{3}{2} \varphi^{1/2} \psi = \frac{3}{2} \cdot \frac{12}{x^2} \psi. \quad (1.14)$$

Из (1.14) видно, что ψ степенным образом зависит от x . Итак, $\psi = B/x^\beta$. Для β из (1.14) получаем квадратное уравнение $\beta(\beta + 1) = 18$, откуда $\beta = (-1 \pm \sqrt{73})/2$. Годится лишь корень $\beta = 3,77 > 0$, для которого $\psi \rightarrow 0$. Следовательно,

$$\varphi \approx \frac{144}{x^3} + \frac{B}{x^{3,77}}. \quad (1.15)$$

С той же точностью, что и в (1.15), решение можно написать в виде

$$\varphi = \frac{144}{x^3 \left(1 + \frac{C}{x^{0,77}}\right)^n},$$

где n и C — пока произвольные числа. Найдем такое n , чтобы $\varphi(0)$ было конечно. Для этого должно быть $3 - 0,77n = 0$, т. е. $n = 3,90$. После этого константу C можно найти из условия $\varphi(0) = 1: 144/C^{3,90} = 1$, откуда $C = (12^{2/3})^{0,77}$.

Окончательно

$$\varphi = \frac{1}{[1 + (x/12^{2/3})^{0,77}]^{3,90}}. \quad (1.16)$$

Это приближенное решение удовлетворительно согласуется с точным решением, найденным

с помощью электронно-вычислительной машины (см. рис. 9).

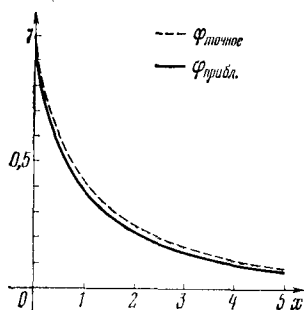


Рис. 9.

2. АТОМНАЯ МЕХАНИКА

В этом разделе будут получены основные результаты атомной механики. Для получения соотношений мы будем использовать, кроме размерных, также модельные оценки. Идея модельных оценок состоит в рассмотрении предельных случаев и упрощенных вариантов задачи.

Оценки скоростей и размеров орбит внутренних электронов атома. Для оценки скорости электрона на внутренней орбите атома нужно составить величину с размерностью скорости из величин, определяющих структуру атома, т. е. из массы электрона m , постоянной Планка $\hbar$ и произведения заряда ядра на заряд электрона $Ze \cdot e$. Действительно, в уравнение движения заряд электрона входит только в виде произведения на заряд ядра, поскольку при рассмотрении внутренних электронов влиянием других электронов можно пренебречь. Задача нерелятивистская, поэтому скорость света не войдет в оценки.

Единственная величина размерности скорости, которую можно составить из m , $\hbar$ и Ze^2 , — это $v \propto Ze^2/\hbar$.

Для оценки порядка величины радиуса внутренних орбит электрона воспользуемся тем, что потенциальная энергия электрона Ze^2/a порядка его кинетической энергии $\sim mv^2$, т. е. $a \sim \hbar^2/Zme^2$.

Для оценки радиуса наружных орбит следует положить $Z \approx 1$, поскольку в этом случае заряд ядра почти нацело заэкранирован внутренними электронами.

Из оценок a и v видно, что при рассмотрении атомных явлений удобны единицы $e = \hbar = m = 1$ (так называемые атомные единицы). В этих единицах скорость света $c = 137,2$, а масса протона $M = 1836$.

Стационарные состояния. Рассмотрим движение частицы в потенциальной яме (рис. 10). Уравнение Шредингера имеет вид

$$\Psi'' + k^2\Psi = 0,$$

причем $k^2 = 2(E - V)$. В классически доступной области потенциальная энергия V меньше полной энергии E . Следовательно, волновая функция Ψ осциллирует в этой области (см. (1.7)). В области, где $E < V$, Ψ -функция экспоненциально затухает.

Энергию стационарных состояний можно оценить из условия, что характерный размер l области, в которой может двигаться частица, содержит целое число n полувольт де Бройля.

Стационарные уровни энергии нельзя получить, исходя из одних лишь размерных соображений, так как величина n безразмерна. Мы будем делать модельные оценки, заменяя потенциальную яму ящиком (рис. 11) с длиной, зависящей от энергии частицы. Длина дебройлевской волны

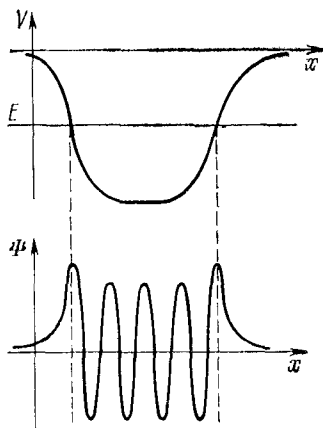


Рис. 10.

$$\lambda = 1/p = 1/\sqrt{2(E - V)},$$

где p — импульс частицы, λ зависит от координаты x . Для оценки можно считать $\lambda \sim 1/\sqrt{2E}$, если E отсчитано от дна ямы.

Итак, оценка стационарных уровней системы E_n получается из соотношения

$$L(E_n) \approx \frac{n}{2} \lambda \sim \frac{2\pi n}{2\sqrt{2E_n}}, \quad (1.17)$$

где $L(E_n)$ — характерная длина области, в которой может двигаться частица.

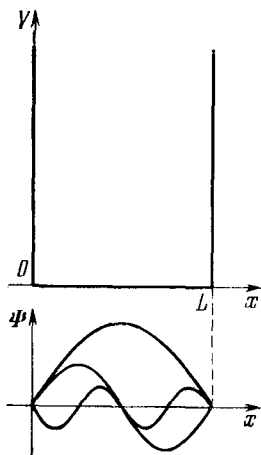


Рис. 11.

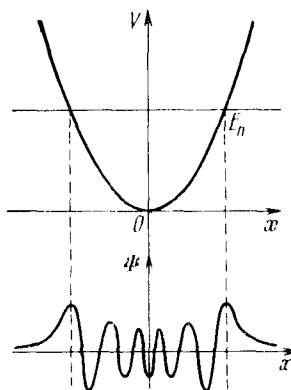


Рис. 12.

Для прямоугольной ямы величина $L(E_n) = L$ — длине ямы. Следовательно, $L = \frac{\pi n}{\sqrt{2E_n}}$, откуда $E_n = \frac{\pi^2 n^2}{2L^2}$. Это выражение удовлетворяет принципу соответствия Бора: при больших квантовых числах расстояние между соседними энергетическими уровнями должно равняться классической частоте движения (см. стр. 133). Действительно,

$$\frac{dE_n}{dn} = 2 \frac{\pi^2 n}{2L^2} = \frac{2\pi}{2L / \frac{\pi n}{L}} = \frac{2\pi}{2L/v} = \frac{2\pi}{T_{\text{кл}}},$$

где $T_{\text{кл}}$ — классический период движения.

Следующий пример — одномерный осциллятор, потенциальная энергия которого $V = \frac{1}{2} \omega^2 x^2$. Здесь ω — частота классического осциллятора. Заметим, что частота осцилляций Ψ -функции около начала координат (рис. 12) больше, чем у краев ямы. Действительно, при $x = 0$ кинетическая энергия движения максимальна, следовательно, длина волны λ минимальна. При заданной энергии E_n характерная длина области L , в которой может двигаться частица, находится из условия $V(L) = E_n$. Итак, $\frac{1}{2} \omega^2 L_n^2 \sim E_n$, откуда $L_n \sim \sqrt{E_n}/\omega$. Условие квантования (1.17) имеет вид $\sqrt{E_n}/\omega \sim n/\sqrt{E_n}$, откуда $E_n = C_1 n \omega$. Из принципа соответствия следует, что $C_1 = 1$.

Как известно, точное решение задачи приводит к спектру осциллятора $E_n = (n + 1/2) \omega$, т. е. при $n = 0$ энергия колебаний отлична от нуля. Это связано с соотношением неопределенностей: частица, движущаяся в малой области d , не может иметь импульс, меньший $\sim 1/d$. Энергия E имеет оценку $E \sim \frac{1}{d^2} + \omega^2 d^2$. Возьмем минимум этого выражения. Эта минимизация соответствует вариационному принципу квантовой механики: $E = \min (\psi | H | \psi)$. В данном случае ψ -функция зависит от одного лишь параметра d . Выражение для E минимально при $d \sim 1/\sqrt{\omega}$. При этом $E_{\min} = C_2 \omega$ (в действительности $C_2 = 1/2$). Величина $d_{\min}^2 \sim 1/\omega$ дает оценку квадрата амплитуды нулевых колебаний.

Аналогичным способом можно рассмотреть движение в кулоновском поле (рис. 13). Ограничимся случаем $l = 0$ (случай $l \neq 0$ будет исследован квазиклассически на стр. 153). Энергия E имеет порядок $\frac{n^2}{L^2} - \frac{Z}{L}$. Минимизируя это выражение, получаем $L = 2n^2/Z$.

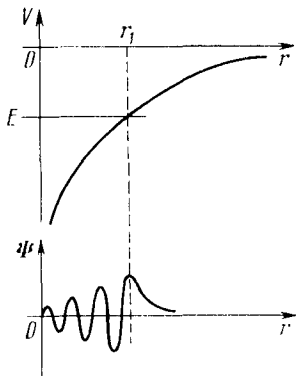


Рис. 13.

Подставляя в выражения для энергии, находим

$$E_n = -\frac{Z^2}{4n^2}.$$

Запишем $E_n = -C_1 \frac{Z^2}{n^2}$ и найдем C_1 из принципа соответствия;

$$\frac{dE_n}{dn} = C_1 \frac{2Z^2}{n^3} = \omega_{\text{кл}} = \frac{2\pi}{T}.$$

Период классического движения

$$T_{\text{кл}} = 2 \int_0^{r_1} \frac{dr}{v} = 2 \int_0^{-\frac{Z}{E_n}} \frac{dr}{\sqrt{2 \left(E_n + \frac{Z}{r} \right)}} = \frac{2\pi Z}{(-2E_n)^{3/2}}.$$

Итак, $C_1 \frac{2Z^2}{n^3} = \frac{2\pi}{2\pi Z} \left(2C_1 \frac{Z^2}{n^2} \right)^{3/2}$, откуда $C_1 = 1/2$.

Окончательно $E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2}$, что, как известно, совпадает с точным решением.

Исследуем более сложный случай, когда частица движется в поле ангармонического осциллятора. Потенциал V равен $\frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \frac{\lambda x^4}{4}$ ($\lambda > 0$). Энергия $E(L)$ имеет следующую оценку:

$$E(L) = \frac{\left(n + \frac{1}{2} \right)^2}{2L^2} + \frac{\omega_0^2 L^2}{2} + \frac{\lambda L^4}{4}.$$

Основное состояние соответствует $n = 0$. Мы выбрали кинетическую энергию основного состояния так, чтобы получилось точное выражение для энергии гармонического осциллятора.

Минимизация этого выражения приводит к уравнению

$$-\frac{\left(n + \frac{1}{2} \right)^2}{L^3} + \omega_0^2 L + \lambda L^3 = 0,$$

или

$$\left(n + \frac{1}{2} \right)^2 = L^4 (\omega_0^2 + \lambda L^2). \quad (1.17')$$

Рассмотрим сначала случай больших λ . Пренебрегая в (1.17') членом с ω_0^2 , получаем $\lambda L^6 = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$. Следовательно, $E_n = \frac{3}{4} \lambda^{1/3} \left(n + \frac{1}{2}\right)^{4/3}$. Учитывая член $\frac{\omega_0^2 L^2}{2}$ по теории возмущений, получаем поправку

$$\Delta E_n = \frac{\omega_0^2}{2} \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)^{2/3}}{\lambda^{1/3}}.$$

В противоположном случае малых λ аналогичным способом получаем

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_0 + \frac{\lambda}{4} \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2}{\omega_0^2}.$$

Решая кубическое уравнение (1.17'), несложно получить и общую формулу для E_n при произвольных λ . Мы не будем приводить ее здесь ввиду громоздкости.

Распределение электрического заряда в атоме. Распределение заряда в тяжелых атомах можно вычислять с помощью приближенного метода, называемого методом Томаса — Ферми (см. также стр. 158). При этом используется тот факт, что в тяжелом атоме большинство электронов имеет большие квантовые числа. Длины волн электронов при этом малы по сравнению с областью изменения потенциала. Тогда плотность электронов в каждой точке атома можно рассчитывать так же, как и плотность свободных электронов в потенциальном ящике с плоским дном.

Пусть наибольший импульс электронов в данной точке равен p_0 . Число состояний в единице объема в интервале $(p, p + dp)$ равно $dp/(2\pi)^3$. Поскольку в основном состоянии атома электроны должны заполнять все состояния с импульсом, меньшим p_0 , то число электронов в единице объема равно

$$n = 2 \int \frac{dp}{(2\pi)^3} = 2 \frac{4}{3} \pi p_0^3 \frac{1}{(2\pi)^3}$$

(множитель 2 возникает из-за двух возможных проекций спина электрона).

Обозначим через $\varphi(r)$ электростатический потенциал атомного поля. Согласно уравнению Пуассона

$$\Delta\varphi = 4\pi n,$$

т. е.

$$\Delta\varphi \sim p_0^3.$$

Свяжем p_0 с φ . Полная энергия электрона равна $\frac{p^2}{2} - \varphi(r)$. Пусть ε_0 — максимальное значение полной энергии в каждой точке атома, т. е.

$$\varepsilon_0 = \frac{p_0^2}{2} - \varphi(r).$$

Величина ε_0 должна быть постоянной, иначе электроны будут переходить из точек с большей энергией в точки с меньшей энергией. Из двух последних формул находим

$$\Delta\varphi \sim (\varphi + \varepsilon_0)^{3/2}$$

или

$$\Delta\varphi \sim \varphi^{3/2},$$

если отсчитывать φ от $-\varepsilon_0$.

Определим радиус l области, в которой находится большинство атомных электронов. Из последней формулы имеем по порядку величины

$$\frac{\varphi}{l^2} \sim \varphi^{3/2}, \text{ откуда } l \sim \varphi^{-1/4}.$$

С другой стороны, величину l можно связать с числом всех электронов атома Z :

$$Z \sim nl^3$$

или, учитывая соотношение $\Delta\varphi \sim n$

$$Z \sim \Delta\varphi l^3 \sim \frac{\varphi}{l^2} l^3 \sim \varphi l.$$

Сравнивая два последних выражения, находим $Z \sim l^{-4} \cdot l$ или

$$l \sim \frac{1}{Z^{1/3}}.$$

Средняя энергия ε атомного электрона по порядку величины равна электростатическому потенциалу $\varphi(l)$.

Так как $l \sim \varphi^{-1/4}$, то получаем

$$\varepsilon \sim l^{-4} \sim Z^{1/3}.$$

Полная энергия всех электронов E имеет порядок величины

$$E \sim \varepsilon Z \sim Z^{1/3}.$$

Число узлов волновой функции есть $l\sqrt{\varepsilon} \sim Z^{1/3}$.

Итак, радиус K -оболочки атома $r_K \sim 1/Z$, расстояние l (томас-фермиевский радиус), на котором находится большинство атомных электронов, $\sim 1/Z^{1/3}$ и радиус наружных оболочек ~ 1 , поскольку эффективный заряд для электронов наружных оболочек ~ 1 .

Распределение электрического заряда в атоме рассматривается подробнее в разделе 3.2.

Формула Розерфорда. Рассмотрим рассеяние легкой частицы с массой m и зарядом e на тяжелой частице с зарядом Ze в нерелятивистском классическом случае. Сечение рассеяния не зависит от массы тяжелой частицы; оно определяется скоростью налетающей частицы v , ее массой и зарядами e и Ze . Из закона Кулона следует, что сечение σ будет зависеть лишь от комбинации Ze^2 . Из этих параметров можно составить только одну величину с размерностью длины, а именно Ze^2/mv^2 ; следовательно, сечение рассеяния $\sigma(\theta) = \left(\frac{Ze^2}{mv^2}\right)^2 f(\theta)$.

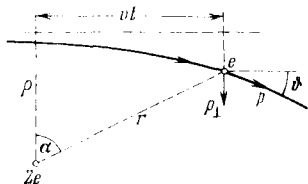


Рис. 14.

Найдем зависимость сечения от угла рассеяния в предельном случае малых углов. Угол отклонения θ приблизительно равен (рис. 14) $\theta \approx p_{\perp}/p$, где p — импульс частицы, а $p_{\perp}$ — импульс, возникающий в направлении, перпендикулярном к исходному. Вычислим $p_{\perp}$:

$$\begin{aligned} p_{\perp} &= \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Ze^2}{r^2} \cos \alpha dt = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Ze^2 \rho dt}{(\rho^2 + v^2 t^2)^{3/2}} = \frac{2Ze^2}{\rho v} \int_0^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{3/2}} = \frac{2Ze^2}{\rho v} \end{aligned}$$

(интеграл берется заменой $x = \operatorname{tg} y$); здесь ρ — прицельное расстояние (см. рис. 14). Следовательно,

$$\theta(\rho) = \frac{2Ze^2}{mv^2\rho}. \quad (1.18)$$

По определению дифференциального сечения рассеяния:

$$d\sigma = \rho \, d\rho \, d\varphi = \rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\theta \, d\varphi = \rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| \frac{\sin \theta \, d\theta \, d\varphi}{\sin \theta},$$

или

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| \frac{1}{\sin \theta}. \quad (1.19)$$

Используя (1.18) и (1.19), получаем формулу Резерфорда для малых углов рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2Ze^2}{mv^2} \right)^2 \frac{1}{\theta^4}. \quad (1.20)$$

Неприменимость классической механики при больших прицельных параметрах. В классической механике полное сечение рассеяния

$$\sigma = \int_0^\infty 2\pi\rho \, d\rho$$

обращается в бесконечность для любых потенциалов кроме обрывающихся, как, например, потенциал твердого шарика. В квантовой механике полное сечение конечно для потенциалов, убывающих с расстоянием быстрее, чем $1/r^2$ (см. ниже). Покажем, что классическая механика становится неприменимой при достаточно малых углах рассеяния, т. е. при достаточно больших прицельных параметрах ρ . Мы увидим, что с увеличением прицельного параметра угол квантовомеханической дифракции $\theta_{\text{диф}}$ уменьшается медленнее, чем угол классического рассеяния $\theta_{\text{кл.}}$. Поэтому начиная с некоторого прицельного параметра ρ_1 угол $\theta_{\text{диф}}$ становится больше $\theta_{\text{кл.}}$. Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния для прицельных параметров рассеяния, больших ρ_1 , нужно рассчитывать по квантовомеханическим формулам. Итак, хотя длина волны λ здесь много меньше характерного

размера, т. е. ρ_1 , условия классичности рассеяния не выполняются, т. е. условие $\lambda \ll \rho_1$ — необходимое, но вовсе не достаточное условие применимости классической механики в задаче рассеяния.

Получим критерий применимости классической механики. Согласно оценке $\theta_{\text{кл}} \approx p_{\perp}/p$ заключаем, что

$$\theta_{\text{кл}} \sim p_{\perp} \Delta t / p \sim \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\Delta t}{p} \sim \frac{V(\rho)}{p} \frac{\Delta t}{\rho} \sim \frac{V(\rho)}{p v}, \text{ т. е. } \theta_{\text{кл}} \sim \frac{V(\rho)}{E}.$$

Здесь мы предположили, что $\frac{\partial V}{\partial \rho} \sim \frac{V}{\rho}$, E — энергия частицы, V — потенциал взаимодействия.

Для нахождения угла дифракции рассмотрим следующий опыт. Экран с отверстием диаметра $2a$ ограничивает прицельные параметры рассеяния значениями $\rho \pm a$ (рис. 15). Для применимости классической механики необходимо, чтобы ширина щели a была много меньше прицельного параметра ρ , иначе само понятие прицельного параметра теряет смысл. При сужении отверстия возникает дифракционное рассеяние.

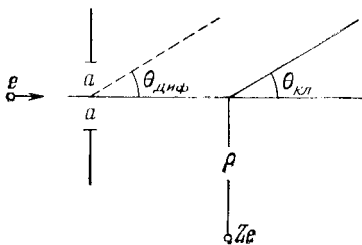


Рис. 15.

Чтобы можно было наблюдать отклонение, необходимо, чтобы дифракционный угол был много меньше угла рассеяния.

Из соотношения неопределенностей видно, что неопределенность в координате a соответствует неопределенности в поперечном импульсе $\Delta p \sim 1/a$. Следовательно, угол дифракции

$$\theta_{\text{диф}} \sim \frac{\Delta p}{p} \sim \frac{1}{p a},$$

где p — импульс падающей частицы. Для применимости классической механики необходимо, чтобы $\theta_{\text{кл}} \gg \theta_{\text{диф}}$ или $\theta_{\text{кл}} \gg 1/pa$, тем самым

$$\theta_{\text{кл}} = \frac{V(\rho)}{E} \gg \frac{1}{p \rho}.$$

Это — общий критерий применимости классической механики для задачи рассеяния. Для потенциалов, спадающих с расстоянием быстрее, чем кулоновский, классический угол рассеяния убывает с ростом прицельного параметра сильнее, чем $1/\rho$. Поэтому всегда найдется прицельный параметр ρ_1 , для которого $\theta_{\text{кл}} \sim \theta_{\text{диф}}$. В случае резерфордского рассеяния $\theta = \frac{2Ze^2}{\rho v}$ и рассеяние будет для всех углов классическим, если $Ze^2/\hbar v \gg 1$.

Оценка сечения рассеяния для потенциалов, спадающих с расстоянием быстрее, чем кулоновский. Мы получили, что классическая механика неприменима при прицельных параметрах, больших ρ_1 , которое определяется из условия равенства классического угла рассеяния дифракционному:

$$\frac{\hbar}{\rho_1 p} = \theta_{\text{кл}}(\rho_1), \quad (1.21)$$

т. е. величина ρ_1 находится из соотношения

$$\frac{\hbar}{\rho_1 p} \sim \frac{V(\rho_1)}{E}. \quad (1.22)$$

Из (1.22) можно найти ρ_1 для любого конкретного вида потенциала $V(\rho)$, спадающего с расстоянием быстрее кулоновского (для последнего обе части соотношения (1.22) пропорциональны $1/\rho$, т. е. ρ_1 найти нельзя). Следовательно, при $\rho < \rho_1$ дифференциальное сечение рассеяния можно вычислять по формулам классической механики.

Полное сечение рассеяния

$$\sigma = \pi \rho_1^2 + \sigma_{\text{диф}},$$

где $\sigma_{\text{диф}}$ — дифракционное сечение рассеяния.

Если потенциал достаточно быстро убывает, то $\sigma_{\text{диф}}$ может быть оценено как дифракционное сечение рассеяния на экране радиуса ρ_1 , т. е. $\sigma_{\text{диф}}$ имеет порядок $\pi \rho_1^2$, так что

$$\sigma \sim 2\pi \rho_1^2.$$

Оценим полное сечение рассеяния для степенного потенциала $V = \alpha/r^n$. Из формулы (1.22) находим $\frac{1}{\rho_1 p} \sim \frac{\alpha}{\rho_1^n E}$,

откуда $\rho_1 \sim (\alpha/v)^{\frac{1}{n-1}}$. Следовательно,

$$\sigma \sim 2\pi\rho_1^2 \sim 2\pi \left(\frac{\alpha}{v}\right)^{\frac{2}{n-1}}.$$

Мы оценивали дифракционную часть рассеяния как дифракцию на экране. Как можно убедиться *), для этого требуется, чтобы потенциал убывал быстрее, чем $1/r^2$, и, следовательно, приведенная оценка справедлива при $n > 2$.

Резонансные эффекты при рассеянии. Рассмотрим сначала рассеяние на потенциале, имеющем сильно отталкивающую сердцевину (рис. 16). Обозначим через V_0 и a соответственно высоту и ширину потенциального барьера. Предположим, что $V_0 \gg E$ — энергии налетающей частицы. Тогда на границе барьера волновая функция обращается в нуль: $\Psi(a) = 0$. Рассмотрим для простоты сферически-симметричное рассеяние и предположим, что при $r > a$ частица движется свободно, т. е. ее волновая функция есть сумма падающей плоской волны e^{ikz} и расходящейся сферической волны $\frac{f}{r} e^{ikr}$, где f — амплитуда рассеяния. Плоская волна e^{ikz} имеет сферически-симметричную часть, равную $\frac{\sin kr}{kr}$. Поэтому

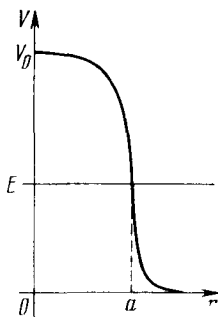


Рис. 16.

$$\int \Psi \frac{d\Omega}{4\pi} \Big|_{r>a} = \frac{\sin kr}{kr} + \frac{f}{r} e^{ikr}.$$

Используя граничное условие $\Psi(a) = 0$, находим $\frac{\sin ka}{k} + f e^{ika} = 0$, или

$$f = -\frac{\sin ka}{k} e^{-ika}.$$

*) Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 548.

Если энергия частицы такова, что $ka = n\pi$, где n — целое число, то $f = 0$, т. е. сечение s -рассеяния обращается в нуль. Этот резонансный эффект в полном сечении ослаблен тем, что при $ka \gtrsim 1$ в рассеянии существенны и волны с $l \neq 0$. Поэтому полное сечение рассеяния не обращается в нуль.

Как видно из выражения для амплитуды рассеяния наибольшее сечение получается при $ka = (2n + 1) \frac{\pi}{2}$. $\sigma = 4\pi\lambda^2$. При малых k ($ka \ll 1$) сечение $\sigma = 4\pi a^2$.

Резонансные эффекты при рассеянии используются в так называемой просветленной оптике: на поверхность линзы наносится слой вещества такой толщины, чтобы при нормальном падении света разность фаз от слоя и линзы составила целое число π . В результате на поверхности линзы не происходит отражения света и все потери обусловлены лишь поглощением.

Аналогичное явление происходит при рассеянии частиц на потенциальной яме ($V < 0$). Как и в случае $V > 0$, сечение рассеяния принимает различные значения в зависимости от фазы волновой функции у края ямы. При определенных значениях фазы сечение обращается в нуль. Этот эффект наблюдался впервые Рамзауэром при рассеянии электронов на атомах. Классическая теория рассеяния не может объяснить это явление. Другой пример, где классическая механика решительно противоречит эксперименту, — это захват медленных нейтронов ядрами. Сечение этого процесса ($\sim 4\pi\lambda^2$) превышает классическое сечение ($\sigma_{\text{кл}} = \pi R^2$, где R — радиус ядра) в десятки тысяч раз.

Взаимодействие между атомами. Оценим величину взаимодействия нейтрального атома с ионом и с нейтральным атомом на больших расстояниях. Ион создает электрическое поле $\mathcal{E} = Z_1/r^2$, где Z_1 — заряд иона. Нейтральный атом, находящийся в электрическом поле $\mathcal{E}$, приобретает дипольный момент $d = \alpha\mathcal{E}$, где α — поляризуемость атома. Следовательно, взаимодействие иона с нейтральным атомом $V = -\mathcal{E}d = -Z_1^2\alpha/r^4$. В атомных единицах $\alpha \sim 1$, так как главную роль в поляризации атома играют наружные оболочки, для которых все величины ~ 1 в атомных единицах. Таким образом, $V \sim -Z_1^2/r^4$.

Рассмотрим теперь случай, когда оба атома нейтральны. Они индуцируют друг у друга дипольные моменты d_1 и d_2 . Диполь-дипольное взаимодействие между атомами равно $V \sim -d_1 d_2/r^3$.

Среднее значение $\bar{d}_1$ и $\bar{d}_2$ по основному состоянию равно нулю, так как атомы не имеют постоянных дипольных моментов. Однако среднее значение $\bar{d}_1^2$, $\bar{d}_2^2$ отлично от нуля. Дипольный момент колеблется со всеми возможными атомными частотами:

$$d = \sum_{\omega} d_{\omega} e^{i\omega t}.$$

Дипольный момент $d_{1\omega}$ создает поле $\mathcal{E}_{\omega} \sim \frac{d_{1\omega}}{r^3}$. Момент $d_{2\omega}$ в этом поле равен $\alpha_2 \mathcal{E}_{\omega}$. Подставляя $d_{2\omega}$ в энергию взаимодействия, получим после усреднения по времени:

$$V \sim - \sum_{\omega} d_{2\omega} \mathcal{E}_{\omega} = - \frac{1}{r^6} \sum_{\omega} d_{1\omega}^2 \alpha_2(\omega) \sim - \frac{1}{r^6}.$$

Такое взаимодействие называют взаимодействием Ван дер Ваальса.

Ионизация атомов. Оценим потери энергии при движении электрона с энергией, много большей энергии электронов атомных оболочек.

Налетающий электрон, сталкиваясь с электронами атомных оболочек, выбрасывает их из атома. При большой энергии налетающего электрона его угол отклонения ϑ мал. Поэтому сечение рассеяния на одном электроны оболочки определяется формулой $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{p^4 \vartheta^4}$; здесь p — импульс налетающего электрона.

Обозначим через q изменение импульса налетающего электрона; величина q связана с углом рассеяния ϑ соотношением $q \approx p\vartheta$. Энергия ΔE , передаваемая при столкновении, равна $q^2/2$. Потери энергии электрона на единице длины пути равна:

$$\frac{dE}{dx} = -nZ \int \Delta E d\sigma,$$

где nZ — полное число электронов в единице объема,

$d\sigma$ — дифференциальное сечение. Имеем:

$$-\frac{dE}{dx} \sim Zn \int q^2 \frac{1}{p^4 \vartheta^4} \vartheta d\vartheta = Zn \frac{1}{p^2} \int \frac{dq}{q} = \frac{Zn}{p^2} \ln \frac{q_{\max}}{q_{\min}}.$$

Так как максимальная передаваемая энергия порядка энергии налетающей частицы, то $q_{\max} \sim p$ ($\vartheta_{\max} \sim 1$).

Минимальный передаваемый импульс соответствует случаю, когда время пролета τ становится порядка обратных частот атома, т. е. $\omega_0 \tau \sim 1$. При больших временах пролета поле налетающего электрона практически не содержит фурье-компонент с атомными частотами и вероятность ионизации резко убывает. Прицельный параметр ρ , соответствующий этому условию, определяется соотношением $\rho = v\tau = v/\omega$, где v — скорость налетающего электрона.

Поскольку $(e^2/\hbar v) \ll 1$, минимальный угол $\vartheta_{\min}$ определяется не классическим условием, а условием дифракции (см. стр. 41), т. е. $\vartheta_{\min} \sim 1/p\rho$ или $q_{\min} = \omega_0/v$. Следовательно,

$$-\frac{dE}{dx} \sim \frac{Zn}{p^2} \ln \frac{pv}{\omega_0}.$$

Как было выше показано (см. стр. 38), основная масса электронов расположена в области радиуса $a_0/Z^{1/3}$ и энергия каждого из них $\sim Z^{1/3}$. Величина ω_0 имеет порядок $\omega_0 \sim \frac{v}{a} \sim \frac{Z^{2/3}}{Z^{-1/3}} = Z$. Восстанавливая размерность и вводя потенциал ионизации водорода I_0 , получим

$$-\frac{dE}{dx} = C \frac{Znc^2}{mv^2} \ln \frac{E}{I_0 Z}.$$

Точный расчет дает $C = 4\pi$.

Многократное рассеяние. Узкий пучок электронов при прохождении через среду размывается по углам из-за многократного рассеяния. Действительно, хотя отклонение электрона, скажем, направо и налево, равновероятно, средний квадрат угла отклонения отличен от нуля. С аналогичным явлением мы встречаемся в обыденной жизни, наблюдая, как закручивается со временем телефонный шнур. При каждом телефонном разговоре шнур закручивается в ту или иную сторону равновероятно.

Однако после большого числа разговоров шнур оказывается закрученным на угол, пропорциональный квадратному корню из числа разговоров.

Поскольку разброс электронов пучка по углам представляет собой совокупность большого числа независимых случайных процессов, то распределение по углам имеет вид $\Phi(\vartheta) = Ae^{-\vartheta^2/\bar{\vartheta}^2}$ (гауссово распределение). Средний квадрат угла отклонения $\bar{\vartheta}^2$ пропорционален числу столкновений N , равному отношению толщины образца L к длине свободного пробега l . Если $\bar{\vartheta}_1^2$ — средний квадрат угла отклонения при одном столкновении, то

$$\bar{\vartheta}^2 = \bar{\vartheta}_1^2 N = \bar{\vartheta}_1^2 \frac{L}{l} = n\sigma L \bar{\vartheta}_1^2 = \bar{\vartheta}^2 L,$$

где σ — сечение рассеяния, n — число ядер в единице объема, а $\bar{\vartheta}^2$ — средний квадрат угла отклонения на единице длины пути, т. е. $\bar{\vartheta}^2 = n\sigma \bar{\vartheta}_1^2$. Так как, по определению, $\bar{\vartheta}_1^2 = \frac{1}{\sigma} \int \sigma(\vartheta) \vartheta^2 d\Omega$, то $\bar{\vartheta}^2 = n \int \sigma(\vartheta) \vartheta^2 d\Omega$. Для резерфордского рассеяния получаем

$$\bar{\vartheta}^2 \sim 2\pi n \frac{Z^2}{E^2} \ln \frac{\vartheta_{\max}}{\vartheta_{\min}}.$$

Эта формула годится как в релятивистском, так и в нерелятивистском случае.

Рассмотрим два предельных случая: $Z/v \gg 1$ и $Z/v \ll 1$. В первом случае рассеяние для всех углов можно считать классическим (см. стр. 42). Максимальный угол рассеяния определяется либо из условия, что прицельный параметр равен радиусу ядра R , т. е. $\vartheta_{\max} \sim \frac{V(R)}{E} = \frac{Z}{RE}$, если $Z/RE < 1$; либо $\vartheta_{\max} \sim 1$, если $Z/RE > 1$. В случае рассеяния электронов первое из этих условий противоречит соотношению $Z/v \gg 1$. Действительно, условие $E > Z/R$ соответствует релятивистским энергиям, но для скоростей $v \simeq c$, $Z/c < 1$, поэтому имеем $\vartheta_{\max} \sim 1$. Минимальный угол отклонения определяется размерами атома a : $\vartheta_{\min} \sim Z/aE$. Оценивая a по модели Томаса — Ферми, находим $\vartheta_{\min} \sim \frac{Z}{Z^{-1/3}E} \sim \frac{Z^{4/3}}{E}$.

Следовательно, для электронов с $E \ll Z^2 \left(\frac{Z}{v} \gg 1 \right)$

$$\overline{\theta^2} \sim 2\pi n \frac{Z^2}{E^2} \ln \frac{E}{Z^{4/3}}.$$

В случае, когда $Z/v \ll 1$, классический угол отклонения меньше угла квантовомеханической дифракции $\vartheta_{\text{диф}}$. Поэтому углы ϑ_{max} и ϑ_{min} должны определяться следующим образом:

ϑ_{min} — угол дифракции на радиусе атома:

$$\vartheta_{\text{min}} \sim \frac{\lambda}{a} \sim \frac{Z^{1/3}}{p},$$

ϑ_{max} — угол дифракции на ядре:

$$\vartheta_{\text{max}} \sim \frac{\lambda}{R} \sim \frac{1}{pR} \text{ при } \frac{\lambda}{R} < 1, \quad \vartheta_{\text{max}} \sim 1 \text{ при } \frac{\lambda}{R} > 1.$$

Таким образом, в случае $Z/v \ll 1$

$$\overline{\theta^2} = 2\pi n \frac{Z^2}{E^2} \times \begin{cases} \ln \frac{a}{R}, & \lambda/R < 1, \\ \ln \frac{a}{\lambda}, & \lambda/R > 1. \end{cases}$$

3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ИЗЛУЧЕНИЕМ

Нулевые колебания электромагнитного поля. Как известно, энергия электромагнитного поля равна $\int \left(\frac{\mathcal{E}^2}{8\pi} + \frac{\mathcal{H}^2}{8\pi} \right) dr$, где $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$ — напряженности электрического и магнитного полей. Если в пространстве нет зарядов, то электростатический потенциал ϕ можно считать равным нулю. Тогда $\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}$, $\mathcal{H} = \text{rot } A$, где A — векторный потенциал.

Разложим векторный потенциал по плоским волнам:

$$A = \sum_k A_k e^{ikr} + \text{компл. сопряж.}$$

Тогда для энергии электромагнитного поля E получаем следующее выражение:

$$E = \sum_k \left\{ \frac{1}{8\pi c^2} |\dot{A}_k|^2 + \frac{k^2}{8\pi} |A_k|^2 \right\}.$$

Здесь нормировочный объем пространства, в котором находится поле, считается равным единице.

Легко видеть отсюда, что энергия электромагнитного поля равна сумме энергий невзаимодействующих гармонических осцилляторов. Действительно, величина A_k играет здесь роль координаты, $\dot{A}_k$ — скорости, $1/4 \pi c^2$ — массы гармонического осциллятора. Частота осциллятора $\omega_k = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$, где α — жесткость, а m — масса. В данном случае $\alpha = k^2/4 \pi$, $m = 1/4 \pi c^2$, следовательно, $\omega_k = ck$. Первое слагаемое в выражении для E представляет собой кинетическую энергию электромагнитного поля, а второе — потенциальную.

Итак, электромагнитное поле в пространстве без зарядов можно рассматривать как совокупность независимых гармонических осцилляторов со всеми возможными значениями волнового вектора k .

Применим к совокупности гармонических осцилляторов законы квантовой механики. Тогда энергия электромагнитного поля равна

$$E = \sum_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \omega_k,$$

где n_k — номер возбужденного состояния осциллятора с волновым вектором k (число квантов с волновым вектором k). Для простоты здесь опускается значок λ поляризации кванта. Он определяет направление ориентации вектора A_k , лежащего в плоскости, перпендикулярной к k . В основном состоянии все $n_k = 0$ (нет квантов) и $E = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k$.

При этом ни кинетическая, ни потенциальная энергии колебаний не имеют определенного значения.

Следовательно, ни напряженность электрического поля, ни напряженность магнитного поля не имеют определенного значения. Средние значения электрического и магнитного полей при этом равны нулю, но средние значения от квадратов этих величин отличны от нуля. Это означает, что электромагнитное поле в пустоте колеблется. Эти колебания называются нулевыми колебаниями электромагнитного поля.

Теперь можно ответить на следующий вопрос: почему атомы не находятся неограниченно долго в возбужденных состояниях? Ведь возбужденные состояния есть точные стационарные состояния уравнения Шредингера. Причина заключается в том, что в пустоте всегда есть электромагнитное поле, с которым взаимодействует атом. В результате состояния атома перестают быть стационарными.

Рассмотрим взаимодействие частицы с электромагнитным полем. Для того чтобы найти изменение гамильтониана при наложении поля, нужно импульс частицы p заменить на $p - \frac{e}{c} A$, где A — векторный потенциал поля. Следовательно, оператор кинетической энергии $p^2/2m$ преобразуется в $\frac{p^2}{2m} - \frac{e}{mc} pA + \frac{e^2}{2mc^2} A^2$. Последнее слагаемое в этом выражении мало. Его нужно учитывать в задачах, где первый порядок теории возмущений дает нулевой вклад, например, в задаче рассеяния кванта на электроне. Операторы A_k играют роль координаты соответствующего осциллятора поля и поэтому имеют матричные элементы, соответствующие изменению числа квантов на 1.

Вычислим матричный элемент $(A_k)_{01}$ перехода из вакуумного состояния в состояние с одним квантом. Для этого найдем величину $(A_k^2)_{00} = \sum_n (0 | A_k | n) (n | A_k | 0)$. Так как оператор A_k рождает один квант (с частотой ω_k), то в сумме отличен от нуля только член с $n = 1$. Итак, $|(A_k)_{01}| = \sqrt{(|A_k|^2)_{00}}$. Для гармонического осциллятора средние значения кинетической и потенциальной энергий совпадают и равны половине полной энергии. Следовательно, для основного состояния $\bar{T}_k = \bar{U}_k = \frac{1}{2} E_k = \frac{1}{4} ck$. Так как $\bar{U}_k = \frac{k^2}{8\pi} (|A_k|^2)_{00}$, то $\frac{1}{4} ck = \frac{k^2}{8\pi} (|A_k|^2)_{00}$, откуда $(A_k^2)_{00} = \frac{2\pi c}{k}$. Следовательно,

$$|(A_k)_{01}| = \sqrt{\frac{2\pi c}{k}} = \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega_k}}.$$

Аналогично находится матричный элемент от A_k для перехода из состояния с n квантами в состояние с $n + 1$

квантами. Нетрудно получить

$$(A_k)_{n, n+1} = \sqrt{n+1} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega_k}},$$

$$(A_k)_{n, n-1} = \sqrt{n} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega_k}}.$$

Таким образом, матричный элемент перехода частицы из состояния φ_{λ_1} в состояние φ_{λ_2} с испусканием кванта равен

$$V_{\lambda_1 \lambda_2} = \left(-\frac{e\mathbf{p}}{mc} \mathbf{A}_k \right)_{\lambda_1 \lambda_2} = -\frac{e}{mc} (\varphi_{\lambda_1} | \mathbf{p} \boldsymbol{\eta}_{k\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \varphi_{\lambda_2}) \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega_k}}. \quad (1.23)$$

Чтобы перейти к релятивистскому случаю, достаточно для оценки заменить $\mathbf{p}/m$ на $\mathbf{v}$. Здесь $\mathbf{p} \boldsymbol{\eta}_{k\lambda}$ — проекция импульса на направление $\mathbf{A}_k$ ($\boldsymbol{\eta}_{k\lambda}$ — единичный вектор поляризации кванта).

Фотоэффект. Рассмотрим фотоэффект: квант света поглощается атомом, в результате чего из атома вылетает электрон. Число переходов за единицу времени равно

$$\frac{2\pi}{\hbar} |V_{0, \mathbf{p}}|^2 \delta(E_i - E_f),$$

где E_i — энергия начального состояния, равная сумме энергий кванта ω_k и энергии электрона в начальном состоянии ε_0 , а $E_f = \varepsilon_p$ — энергия вылетевшего электрона. Число переходов электрона за единицу времени в состоянии с импульсами $\mathbf{p}$ в интервале $[\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p}]$ равно

$$\begin{aligned} dW &= 2\pi \int |V_{0, \mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon_0 + \omega_k - \varepsilon_p) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} = \\ &= 2\pi \int |V_{0, \mathbf{p}}|^2 \frac{p^2 \frac{d\mathbf{p}}{d\varepsilon_p} d\varepsilon_p}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon_0 + \omega_k - \varepsilon_p) d\Omega = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int |V_{0, \mathbf{p}}|^2 \frac{p^2}{v} d\Omega. \end{aligned}$$

Сечение фотоэффекта равно отношению числа переходов за единицу времени к интенсивности потока квантов. Последняя равна скорости кванта c , так как в нормировочном объеме ($= 1$) находится один квант. Следовательно, по

порядку величины имеем

$$\sigma \sim \frac{4\pi p}{(2\pi)^2 c} |V_{0p}|^2.$$

Покажем, что в выражении (1.23) экспоненту e^{ikr} можно заменить единицей. Действительно, волновое число $k = \omega/c \sim I/c$, где I — потенциал ионизации атома; $I \sim Z^2$ для внутренних электронных оболочек. Радиус этих оболочек $\sim 1/Z$, следовательно, $kr \sim \frac{Z^2}{c} \frac{1}{Z} \sim \frac{Z}{c} \ll 1$ и $e^{ikr} \approx 1$. Экспоненту e^{ikr} тем более можно заменить единицей для наружных оболочек, где $kr \sim 1/c = 1/137$.

Так как $(\varphi_0 | \boldsymbol{p} | \varphi_p) = (\varphi_0 | \dot{\boldsymbol{r}} | \varphi_p) = i(\epsilon_0 - \epsilon_p) (\varphi_0 | \boldsymbol{r} | \varphi_p) = i\omega (\varphi_0 | \boldsymbol{r} | \varphi_p)$, то сечение фотоэффекта имеет порядок величины

$$\sigma \sim \frac{p}{c} \omega^2 |(\varphi_0 | \boldsymbol{r} | \varphi_p)|^2 \frac{1}{\omega} \sim \frac{p\omega}{c} |(\varphi_0 | \boldsymbol{r} | \varphi_p)|^2.$$

Рассмотрим фотоионизацию K -оболочки в двух предельных случаях: когда энергия вылетающего электрона много меньше потенциала ионизации и когда она много больше потенциала ионизации. В первом случае энергия кванта близка к энергии ионизации $I \sim Z^2$, т. е.

$$\sigma \sim \frac{pZ^2}{c} |(\varphi_0 | \boldsymbol{r} | \varphi_p)|^2.$$

Сечение содержит множитель $p \sim \sqrt{E}$. Если бы матричный элемент r_{0p} не зависел от энергии (что неверно в данном случае), то $\sigma \sim \sqrt{E}$. Это обычный результат для сечения реакций вблизи порога (см. стр. 171). Зависимость сечения $\sim \sqrt{E}$ возникла из-за статистического веса конечных состояний:

$$\int \delta(E - \omega) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \sim \int \delta(E - \omega) p^2 dp \sim \int \delta(E - \omega) p dE \sim p.$$

В нашем случае дело обстоит иначе: сечение фотоэффекта при малых энергиях вылетающего электрона не зависит от энергии. Это связано с тем, что дипольный матричный элемент из-за медленности спада потенциала на больших расстояниях ведет себя как $1/\sqrt{r}$ вблизи порога реакции.

Оценим r_{0p} вблизи порога. Волновая функция K -электрона $\varphi_0 \sim e^{-Zr}$, и следовательно, в дипольном матричном элементе существенны малые расстояния $r \sim 1/Z$.

Чтобы оценить r_{0p} , нужно найти $\varphi_p(r)$ при $r \sim 1/Z$. Так как оператор r изменяет угловой момент на 1, то функция вылетающего электрона соответствует состоянию с моментом единица и имеет на бесконечности вид

$$\varphi_p \rightarrow \frac{1}{pr} \cos(pr + \delta_1) \cos \vartheta. \quad (1.24)$$

С другой стороны, радиальная часть этой функции $\varphi_p / \cos \vartheta = u_p / r$, где u_p удовлетворяет уравнению Шредингера

$$u_p'' + P_1^2 u_p = 0,$$

где $P_1^2 = 2 \left(E + \frac{Z}{r} - \frac{2}{r^2} \right)$, $E = p^2/2$.

Приближенное решение этого уравнения, найденное в 1.1 (квазиклассическое приближение), определяется выражением

$$u_p = \frac{A}{\sqrt{P_1(r)}} \cos \left(\int_{r_1}^r P_1(r) dr - \frac{\pi}{2} \right). \quad (1.25)$$

Сравнивая (1.24) с (1.25), находим $A = 1/\sqrt{p}$.

Условие применимости квазиклассического приближения $\frac{d\lambda}{dr} \ll 1$ (см. 1.1 и 3.1). Используя $\frac{d\lambda}{dr} \sim \frac{1}{\sqrt{Zr}}$, получаем условие квазиклассичности, $r > 1/Z$. Итак, квазиклассическое приближение по порядку величины пригодно вплоть до радиуса K -оболочки.

Находим φ_p при $r \sim 1/Z$: $\varphi_p \sim \frac{1}{\sqrt{p}} \frac{1}{\sqrt{Z/r}} \frac{1}{r} \sim \frac{\sqrt{Z}}{\sqrt{p}}$. Дипольный матричный элемент имеет порядок

$$(\varphi_0 | r | \varphi_p) \sim Z^{3/2} \int_0^\infty e^{-Zr} \frac{\sqrt{Z}}{\sqrt{p}} r^2 dr \sim \frac{1}{Z^2 \sqrt{p}}.$$

Таким образом, зависимость $|r_{0p}|^2$ от p компенсирует зависимость статистического веса, и сечение фотоэффекта при малых энергиях не зависит от энергии. Заметим, что

этот результат возник только благодаря плавному ходу кулоновского потенциала. Если бы потенциал, в котором движется электрон, имел вид потенциальной ямы, то на краю ямы возникла бы область, в которой портится квазиклассическое приближение, и приведенная выше оценка была бы неверна. Из формул третьей главы (см. стр. 171) легко убедиться, что в этом случае r_{0p} не зависит от p , и ход сечения фотоэффекта вблизи порога определяется статистическим весом.

Итак, при $E - I \ll I$ полное сечение фотоэффекта

$$\sigma \sim \frac{pZ^2}{c} \left(\frac{1}{Z^2} \right)^2 \frac{1}{p},$$

или

$$\sigma = \frac{C_1}{cZ^2}, \quad C_1 \sim 1. \quad (1.26)$$

Рассмотрим другой предельный случай, когда энергия вылетающего электрона много больше потенциала ионизации. Оценим дипольный матричный элемент и сечение фотоэффекта. Волновая функция непрерывного спектра имеет вид $\varphi_p = F e^{ipr}$, где F — функция, стремящаяся к единице при $r \rightarrow \infty$. В матричном элементе $(\varphi_0 | p | \varphi_p)$, как мы увидим, существенны расстояния $r \sim 1/p$. Отклонение F от единицы определяется величиной $V(r)/E$. При $r \sim 1/p$ $V/E \sim \sqrt{I/E}$ и можно полагать $F \approx 1$.

Учет поляризации кванта внесет лишь множитель порядка 1. Следовательно,

$$\sigma \sim \frac{1}{pc} |(\varphi_0 | p | \varphi_p)|^2 \sim \frac{p}{c} |(\varphi_0 e^{ipr})|^2.$$

Интегрируя по углам, получаем

$$(\varphi_0 e^{ipr}) \sim Z^{3/2} \int_0^\infty e^{-Zr} \frac{\sin pr}{pr} r^2 dr = \frac{Z^{3/2}}{2p} \int_{-\infty}^\infty r e^{-Z|r|} \sin pr dr.$$

Оценим это выражение. Легко видеть, что вторая производная от функции $f(r) = r e^{-Z|r|}$ имеет скачок при $r = 0$. Поэтому далекие фурье-компоненты этой функции имеют оценку (см. 1.1) $\sim Z/p^3$.

Если бы потенциал V как функция r^2 не имел особых точек на вещественной оси, то волновая функция как скаляр была бы аналитической функцией r^2 . В этом случае

далекая фурье-компонента волновой функции как функция энергии была бы экспоненциально мала (см. 1.1). Степенная зависимость матричного элемента от энергии в нашем случае возникает из-за корневой особенности кулоновской волновой функции (см. стр. 192).

Итак, матричный элемент $(\varphi_0 e^{i p r})$ при $p \rightarrow \infty$ имеет оценку $Z^{5/2}/p^4$, а сечение фотоэффекта

$$\sigma \sim \frac{Z^5 p}{c p^8}, \text{ т. е. } \sigma = \frac{C_2 Z^5}{c E^{7/2}}, \text{ или } \sigma \sim \frac{2^{7/2} C_2}{c Z^2} \left(\frac{I}{E} \right)^{7/2}. \quad (1.27)$$

Здесь I — потенциал ионизации K -электрона, равный $Z^2/2$. Численный расчет показывает, что $C_2 \sim 10$.

Если положить в (1.27) энергию E равной потенциалу ионизации I , то мы должны получить по порядку величины формулу (1.26). Однако, как показывают численные расчеты, формула (1.27) дает при $E = I$ сечение, на порядок большее, чем (1.26). Это означает, что переход от области $E - I \ll I$ к области $E \gg I$ оказывается сильно растянутым.

ЗАДАЧА

Оценить сечение фотоэффекта для энергии E вблизи порога I и больших E в случае прямоугольной ямы.

Времена жизни возбужденных состояний атома. а) Оценим время жизни состояния $2p$ водородоподобного атома. Электрон из состояния $2p$ переходит в состояние $1s$, испуская дипольный γ -квант. Число переходов в единицу времени (обратное время жизни) равно

$$W_{01} = 2\pi \int |V_{01}|^2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(E_0 - E_1 - \omega),$$

где $V = -\frac{1}{c} p A$ — потенциал взаимодействия электрона с электромагнитным полем. Индекс 0 соответствует состоянию $1s$, индекс 1 — состоянию $2p$, ω — энергия γ -кванта. Так как

$$d^3k = k^2 dk d\Omega = k^2 \frac{dk}{d\omega} d\Omega d\omega,$$

то

$$W_{01} = 2\pi \int |V_{01}|^2 \frac{k^2 \frac{dk}{d\omega} d\Omega}{(2\pi)^3}.$$

Оценим матричный элемент перехода V_{01} ; учитывая нормировку потенциала A электромагнитного поля (см. стр. 50), находим

$$V_{01} = -\frac{1}{c} (pA)_{01} \sim \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} p_{01}.$$

Здесь мы не интересуемся поляризацией γ -кванта, учет которой внесет лишь численные множители порядка единицы. Оценим матричный элемент импульса p :

$$p_{01} = i\omega r_{01} \sim \frac{\omega}{Z}.$$

Следовательно,

$$W_{01} \sim \frac{\omega^2}{Z^2} \frac{1}{\omega} k^2 \frac{dk}{d\omega} \sim \frac{\omega^3}{Z^2 c^3}.$$

Так как частота перехода ω имеет порядок Z^2 , то окончательно находим

$$W_{01} \sim \frac{Z^4}{c^3}.$$

Оценим численно время жизни состояния относительно дипольного перехода. Атомное время жизни имеет порядок

$$\tau_{\text{ат}} \sim \frac{\hbar}{E_{\text{ат}}} \sim \frac{10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}}{27 \text{ эв} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эв}} \approx 2 \cdot 10^{-17} \text{ сек}.$$

Следовательно, $\tau_{\text{дип}} \sim \frac{c^3}{Z^4} \tau_{\text{ат}}$. Для атома водорода $\tau_{\text{дип}} \sim 10^7 \cdot 10^{-17} = 10^{-10} \text{ сек}$. Точный расчет дает несколько большие значения $\tau_{\text{дип}}$.

б) Оценим время жизни квадрупольных переходов, например, $3d \rightarrow 1s$. Ранее в операторе A электромагнитного поля мы заменяли множитель e^{ikr} (k — волновой вектор кванта) единицей $\left(kr = \frac{\omega}{c} r \sim \frac{Z}{c} \ll 1\right)$. При рассмотрении квадрупольных переходов нужно разложить e^{ikr} в ряд, причем главный вклад внесет член разложения ikr . Получаем

$$V_{01} = i \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} ((\eta p)(kr))_{01},$$

где η — поляризация кванта.

Направим ось z по вектору η , а ось x — по k (вектор поляризации кванта η перпендикулярен волновому вектору k). Тогда

$$\begin{aligned} V_{01} &= ik \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} (p_z x)_{01} = \\ &= ik \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \left[\frac{1}{2} (p_z x - p_x z) + \frac{1}{2} (p_z x + p_x z) \right]_{01} = \\ &= ik \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \left[-\frac{1}{2} [r p]_y + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (zx) \right]_{01}. \end{aligned}$$

Первое слагаемое в этом выражении представляет собой матричный элемент от y -проекции момента количества движения, т. е. соответствует дипольному магнитному переходу. Произведение zx — это компонента квадрупольного момента, т. е. второе слагаемое определяет вероятность квадрупольного электрического перехода. Оба слагаемых имеют одинаковый порядок величины.

Оценим численно время жизни состояния относительно квадрупольного перехода. В отличие от дипольных переходов, в матричный элемент добавляется множитель kr . Следовательно,

$$\tau_{\text{квад}} \sim \tau_{\text{дип}} \frac{1}{(kr)^2} \sim \tau_{\text{дип}} \frac{c^2}{Z^2}.$$

Для атома водорода $\tau_{\text{квад}} \sim 10^{-10} \cdot 10^4 \sim 10^{-6}$ сек.

ЗАДАЧА

Оценить время жизни водородоподобного атома по отношению к испусканию двух квантов.

О т в е т. $\tau \sim c^6/Z^6$.

Тормозное излучение. Оценим эффективное сечение излучения γ -квантов при рассеянии электрона на ядре. Предположим, что частота γ -квантов много меньше энергии электрона. Тогда излучение слабо влияет на движение электрона и эффективное сечение приблизительно равно произведению сечения рассеяния электрона на вероятность испускания γ -кванта.

Оценим вероятность испускания фотона при заданном движении электрона. Уравнение Шредингера для фотона в

энергетическом представлении имеет вид

$$i\dot{C}_n = \sum_{n'} V_{nn'} C_{n'} e^{i(\omega_n - \omega_{n'})t}, \quad (1.28)$$

где V описывает взаимодействие электрона с электромагнитным полем, а C_n — амплитуда состояния с n квантами с заданными волновым вектором и поляризацией.

В основном состоянии $C_0 = 1$, а все $C_n = 0$. В первом порядке теории возмущений отлична от нуля амплитуда перехода в состояние с одним квантом, C_1 . Из (1.28) получаем

$$i\dot{C}_1 = V_{10} e^{i\omega t},$$

откуда

$$C_1 = -i \int_{-\infty}^{\infty} V_{10} e^{i\omega t} dt = +i \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{c} \mathbf{v} \mathbf{A} \right)_{10} e^{i\omega t} dt.$$

Мы написали взаимодействие с излучением для бесспиновых частиц. Для частиц со спином взаимодействие усложняется, но по порядку величины может быть оценено по этой же формуле.

Поскольку излучение не влияет на рассеяние электрона, то скорость v можно считать заданной функцией времени.

Следовательно, так как

$$A \sim \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega}} \eta e^{-ikr} \approx \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega}} \eta e^{-i\omega \frac{vn}{c} t},$$

то

$$C_1 = i \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} (v\eta) e^{i\omega t - i\omega \frac{vn}{c} t} dt, \quad (1.29)$$

где η — единичный вектор поляризации кванта, n — единичный вектор k/k .

Так как время соударения электрона много меньше, чем интервал t , существенный в этом интеграле, $t \sim \frac{1}{\omega \left(1 - \frac{vn}{c}\right)}$,

то можно считать, что скорость частицы в момент времени

$t = 0$ скачкообразно изменилась с $v = v_1$ на $v = v_2$. Тогда из (1.29) находим

$$C_1 = i \sqrt{\frac{2n}{\omega}} \left\{ (v\eta) \frac{e^{i\omega \left(t - \frac{vn}{c} t\right)}}{i\omega \left(1 - \frac{vn}{c}\right)} \right|_{-\infty}^0 + (v\eta) \frac{e^{i\omega \left(t - \frac{vn}{c} t\right)}}{i\omega \left(1 - \frac{vn}{c}\right)} \right|_0^{\infty} \right\} = \\ = \sqrt{\frac{2n}{\omega^2}} \eta \left(\frac{v_1}{1 - \frac{v_1 n}{c}} - \frac{v_2}{1 - \frac{v_2 n}{c}} \right). \quad (1.30)$$

Для малых углов отклонения электрона и кванта из (1.30) получаем

$$C_1^2 \sim \frac{1}{\omega^3} \frac{(\Delta v)^2}{(1 - v/c)^2}; \quad (1.31)$$

здесь Δv — изменение скорости электрона. Так как знаменатели выражения (1.30) при малых углах отклонения кванта ϑ_K и электрона ϑ_e имеют вид

$$1 - \frac{v}{c} + \frac{\vartheta_K^2}{2}, \quad 1 - \frac{v}{c} + \frac{(\vartheta_K + \vartheta_e)^2}{2},$$

то существенные углы отклонения ограничены условием

$$\vartheta_K, \vartheta_e \lesssim \sqrt{1 - \frac{v}{c}}. \quad (1.32)$$

Оценим вероятность испускания кванта в интервал частот $[\omega, \omega + d\omega]$ при заданном изменении скорости электрона Δv . Для этого умножим (1.31) на статистический вес конечных состояний кванта $dk/(2\pi)^3$:

$$dW \sim \frac{1}{\omega^3} \frac{(\Delta v)^2}{\left(1 - \frac{v}{c}\right)^2} k^2 dk d\Omega_K \sim \frac{(\Delta v)^2}{c^3 \left(1 - \frac{v}{c}\right)^2} \frac{d\omega}{\omega} \vartheta_K d\vartheta_K. \quad (1.33)$$

Сечение тормозного излучения равно произведению вероятности испускания кванта dW на сечение кулоновского рассеяния для релятивистских электронов:

$$d\sigma_{\text{т.и.}} \sim \frac{(\Delta v)^2 \vartheta_K^2}{c^3 \left(1 - \frac{v}{c}\right)^2} \frac{d\omega}{\omega} \cdot \frac{Z^2}{E^2} \frac{d\Omega_e}{\sin^4 \frac{\vartheta_e}{2}}$$

или при малых углах рассеяния ($\sin \theta_0 \approx \theta_0 \approx q/p$)

$$d\mathcal{E}_{\text{т.и}} \sim \frac{q^2 \left(1 - \frac{v}{c}\right)}{c^3 \left(1 - \frac{v}{c}\right)} \frac{d\omega}{\omega} \cdot \frac{Z^2}{p^2 c^2} \frac{\theta_0 d\theta_0}{\theta_0^4} \sim \frac{Z^2}{c^5} \frac{d\omega}{\omega} \frac{dq}{q}. \quad (1.34)$$

Найдем вероятность испускания кванта для произвольного изменения импульса электрона. Для этого проинтегрируем (1.34) по q . Будем считать электрон ультрарелятивистским, т. е. $1 - v/c \ll 1$. Так как $Ze^2/\hbar c \ll 1$, то минимальный угол отклонения будет определяться дифракцией электрона на радиусе атома $a \sim Z^{-1/3}$, а максимальный — условием (1.32) (см. стр. 48).

Интегрируя (1.34) по q , получаем

$$\int \frac{d\mathcal{E}_{\text{т.и}}}{dq} dq \sim \frac{Z^2}{c^5} \frac{d\omega}{\omega} \ln \frac{q_{\max}}{q_{\min}} \sim \frac{Z^2}{c^5} \frac{d\omega}{\omega} \ln \frac{c}{Z^{1/3}}. \quad (1.35)$$

Оценим сечение тормозного излучения квантов с произвольными частотами. Интегрируя (1.35) по ω , находим

$$\sigma_{\text{т.и}} \sim \frac{Z^2}{c^5} \ln \frac{c}{Z^{1/3}} \cdot \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}}. \quad (1.36)$$

Максимальная частота кванта — порядка энергии электрона:

$$\omega_{\max} \sim \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

При $\omega_{\min} \rightarrow 0$ выражение (1.36) расходится (см. стр. 62). Однако потери энергии электрона на тормозное излучение будут конечными: $-\frac{dE}{dx} = \int n\omega d\mathcal{E}_{\text{т.и}}$, где n — число ядер в единице объема. Окончательно,

$$-\frac{dE}{dx} \sim \frac{Z^2 n}{c^5} E \ln \frac{c}{Z^{1/3}}.$$

Образование пар. Напомним читателю, что релятивистски инвариантное уравнение движения электрона — уравнение Дирака — при заданном импульсе p электрона имеет собственные функции, отвечающие не только положительным, но и отрицательным значениям энергии:

$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$. Для того чтобы объяснить, почему электрон не переходит в отрицательные состояния с испусканием кванта, Дирак предположил, что все отрицательные состояния в вакууме заполнены электронами. Тогда переход в эти состояния запрещен принципом Паули. Незаполненное отрицательное состояние означает, что в вакууме есть позитрон.

С этой точки зрения механизм образования пар аналогичен механизму фотоэффекта: квант переводит электрон из состояния с отрицательной энергией в состояние с положительной энергией. В пустоте такой процесс невозможен, как это сразу видно из законов сохранения энергии и импульса. В поле ядра процесс делается возможным, так как электрон передает излишек импульса ядру.

Можно оценить сечение образования пар на ядре аналогично тому, как это делалось для тормозного излучения: найти вероятность образования пар при заданной величине передаваемого ядру импульса, а затем умножить эту вероятность на сечение рассеяния электрона на ядре и проинтегрировать по всем значениям передаваемого импульса.

Можно получить сечение образования пар, рассматривая этот процесс как обратный тормозному излучению. Строго говоря, процесс, обратный тормозному излучению, соответствует поглощению кванта и переходу электрона из одного состояния с положительной энергией в другое. Однако в ультрарелятивистском случае, которым мы для простоты ограничимся, собственные функции, соответствующие отрицательной энергии (т. е. соответствующие позитрону), мало отличаются от функций для положительной энергии (кулоновское поле ядра вносит малую поправку). Следовательно, сечение образования пар можно приближенно рассматривать как процесс, обратный тормозному излучению.

Сечения прямого и обратного процессов относятся как статистические веса конечных состояний. В случае тормозного излучения в конечном состоянии есть электрон и квант, тогда как в случае образования пар — позитрон и электрон. Но при больших энергиях статистический вес кванта не отличается от статистического веса электрона той же энергии, и поэтому сечение образования пар совпадает по порядку величины с сечением тормозного излучения, проинтегрированным по энергиям квантов порядка

энергии электрона. Таким образом,

$$\sigma_{\text{пар}} \sim \frac{Z^2}{c^5} \ln \frac{c}{Z^{1/3}}.$$

Потери энергии квантов на единице пути вследствие образования пар имеют порядок

$$-\frac{d\ell}{dx} \sim \frac{nZ^2}{c^5} E \ln \frac{c}{Z^{1/3}},$$

т. е. совпадают по порядку величины с потерями энергии ультрарелятивистского электрона на тормозное излучение.

Рождение мягких квантов при рассеянии заряженных частиц («инфракрасная катастрофа»). Рассмотрим задачу о рождении мягких квантов при рассеянии частицы на ядре. Будем предполагать частицу нерелятивистской. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = T + V - \frac{1}{c} \mathbf{p} \mathbf{A} + H_\gamma. \quad (1.37)$$

Здесь T — кинетическая энергия частицы, V — рассеивающий потенциал, $-\frac{1}{c} \mathbf{p} \mathbf{A}$ — взаимодействие частицы с полем квантов, H_γ — гамильтониан поля квантов (см. выше).

Предположим, что энергия квантов много меньше энергии частицы. Тогда движение частицы можно считать заданным и рассматривать только ту часть гамильтониана, которая содержит операторы, действующие на ψ -функцию квантов. Гамильтониан γ -квантов за время столкновения, которое будем считать малым, меняется от величины $H_0 = H_\gamma - \frac{1}{c} \mathbf{p}_0 \mathbf{A}$ до столкновения к величине $H_1 = H_\gamma - \frac{1}{c} \mathbf{p}_1 \mathbf{A}$ после столкновения. Перейдем в систему координат, в которой частица до рассеяния покоилась. Тогда

$$H_0 = H_\gamma, \quad H_1 = H_\gamma - \frac{1}{c} \mathbf{q} \mathbf{A}, \quad (1.38)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0$ — изменение импульса частицы в результате столкновения.

Возмущение $-\frac{1}{c} \mathbf{q} \mathbf{A}$ для малых частот становится большим, так как $A_{k\omega} \sim 1/\sqrt{\omega}$. Поэтому мы не будем пользоваться теорией возмущений, а используем только внезапность изменения гамильтониана γ -квантов.

Введем собственные функции χ_n гамильтониана H_0 и χ'_n гамильтониана H_1 . Предположим, что до столкновения система γ -квантов находилась в состоянии χ_0 . Ввиду внезапности столкновения волновая функция системы χ_0 практически не изменяется. Следовательно, амплитуда перехода в состояние χ'_n равна $(\chi'_n | \chi_0)$ (см. стр. 86).

Представим гамильтониан электромагнитного поля, равный

$$H_\gamma = \int \left(\frac{1}{8\pi c^2} \dot{A}^2 + \frac{1}{8\pi} (\text{rot } A)^2 \right) d\mathbf{r}, \quad (1.39)$$

в виде суммы гамильтонианов отдельных осцилляторов поля. Для этого запишем векторный потенциал A в виде

$$A = \sum_{k\lambda} \sqrt{2\pi c^2} \eta_{k\lambda} (q_{k\lambda} \exp(ik\mathbf{r} - i\omega_{k\lambda}t) + q_{k\lambda}^* \exp(-ik\mathbf{r} + i\omega_{k\lambda}t)). \quad (1.40)$$

Здесь k — волновой вектор, λ — поляризация, $\omega_{k\lambda}$ — энергия квантов, $\eta_{k\lambda}$ — единичный вектор поляризации. Опуская далее значки $k\lambda$ и обозначая

$$q = Q + \frac{i}{\omega} P, \quad q^* = Q - \frac{i}{\omega} P,$$

получим, подставляя в (1.39)

$$H_\gamma = \sum \frac{1}{2} (P^2 + \omega^2 Q^2). \quad (1.41)$$

В случае мягких квантов экспоненту $e^{ik\mathbf{r}}$ можно заменить единицей. Будем считать временные множители $\exp(\pm i\omega t)$ включенными в q, q^* . Тогда

$$A = \sum \sqrt{2\pi c^2} \eta \cdot 2Q.$$

Гамильтониан квантов H_1 имеет вид

$$H_1 = \sum \left\{ \frac{1}{2} (P^2 + \omega^2 Q^2) - 2 \sqrt{2\pi} (\eta q) Q \right\}. \quad (1.42)$$

Представим его в виде суммы осцилляторных гамильтонианов со смещенной координатой:

$$H_1 = \sum \left\{ \frac{1}{2} P^2 + \frac{1}{2} \omega^2 (Q - \delta)^2 - \frac{1}{2} \omega^2 \delta^2 \right\}, \quad (1.43)$$

где $\delta = \frac{2\sqrt{2\pi}}{\omega^2}(\eta q)$. Следовательно, волновые функции после столкновения $\chi'_n(Q)$ имеют вид осцилляторных функций, но со смещенной координатой:

$$\chi'_n(Q) = \chi_n(Q - \delta).$$

Таким образом, амплитуда перехода в состояние χ'_n имеет вид

$$C_n = \int \chi_n(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ. \quad (1.44)$$

Рассмотрим сначала два предельных случая — малые и большие δ по сравнению с амплитудой нулевых колебаний.

Если δ мало, то из (1.44) следует

$$C_n \approx -\delta \int \frac{\partial \chi_n}{\partial Q} \chi_0 dQ = i\delta (P)_{0n}, \quad (1.45)$$

где P — оператор импульса. Он имеет отличные от нуля матричные элементы лишь для изменения числа квантов на единицу. Так как энергия нулевых колебаний равна $\omega/2$, то из (1.41) вытекает, что $|(P)_{01}|^2 = \omega/2$. Поэтому вероятность испускания одного кванта равна $w_1 = \frac{1}{2}\omega\delta^2 = \frac{4\pi}{\omega^3}(\eta q)^2$. Эта формула совпадает с результатом обычной теории возмущений.

Оценим матричный элемент $C_n = \int \chi_n(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ$, когда смещение δ много больше амплитуды колебаний осциллятора. Для этого воспользуемся квазиклассическим выражением для функции χ_n (см. 1.1 и 3.1):

$$\chi_n(Q) = \frac{a_n}{\sqrt{E_n - 1/2 Q^2}} \cos\left(\int \sqrt{E_n - 1/2 Q^2} dQ - \frac{\pi}{4}\right).$$

Для простоты здесь частота осциллятора ω взята равной единице (результаты легко переносятся на случай $\omega \neq 1$). Нормировочный множитель a_n порядка единицы. Действительно,

$$1 = \int \chi_n^2 dQ \sim \frac{a_n^2}{\sqrt{E_n}} l_n \sim \frac{a_n^2}{\sqrt{E_n}} \frac{\sqrt{E_n}}{\omega}.$$

Поэтому

$$C_n \sim \int \frac{\exp(-Q^2/2)}{\sqrt[4]{E_n - 1/2(Q - \delta)^2}} \times \\ \times \cos\left(\int \sqrt{E_n - 1/2(Q - \delta)^2} dQ - \frac{\pi}{4}\right) dQ. \quad (1.46)$$

Так как величина δ , по предположению, много больше амплитуды нулевых колебаний, то можно под знаком корня в (1.46) пренебречь членом $Q^2/2$. Обозначим $E_n - \delta^2/2 \equiv \Delta E$ и заменим переменную интегрирования Q : $\Delta E/\delta + Q = x$. Тогда из (1.46) находим:

$$C_n \sim \\ \sim \int_0^\infty \frac{\cos(\delta^{1/2} x^{3/2})}{\sqrt[4]{\delta x}} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + 2x \frac{\Delta E}{\delta}\right) dx \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta E}{\delta}\right)^2\right]. \quad (1.47)$$

Значения x , существенные в этом интеграле, соответствуют аргументу косинуса порядка единицы, т. е. имеют порядок величины $x \sim \delta^{-1/2}$. Поэтому

$$C_n \sim \frac{1}{\sqrt[4]{\delta}} \sqrt[12]{\delta} \delta^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta E}{\delta}\right)^2\right], \\ |C_n|^2 \sim \frac{1}{\delta} \exp\left[-\left(\frac{\Delta E}{\delta}\right)^2\right].$$

Таким образом, распределение вероятности испускания квантов имеет вид гауссовой кривой с максимумом $w_{\max} \sim 1/\delta$ и шириной $\Delta E \sim \delta$ около значения $E = \delta^2/2$, которое, как нетрудно видеть, совпадает с энергией классического осциллятора, начало координат которого внезапно сдвинуто на величину δ .

Теперь перейдем к вычислению C_n для произвольных δ . Вычислим сначала вероятность того, что не будет рождено ни одного кванта данного типа, т. е.

$$w_0 = \left| \int \chi_0(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ \right|^2.$$

Так как волновая функция основного состояния осциллятора имеет вид

$$\chi_0(Q) = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \omega Q^2\right),$$

то

$$w_0 = \left| \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\omega Q^2 - \frac{1}{2} \omega \delta^2 + \omega Q \delta \right) dQ \right|^2 = \\ = \exp \left(-\frac{1}{4} \omega \delta^2 \right) = \exp \left[-\frac{4\pi}{\omega^3} (q\eta)^2 \right]. \quad (1.48)$$

Восстановим теперь значки k, λ . Тогда

$$w_0^{k\lambda} = \exp \left[-\frac{4\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2 \right]$$

— вероятность того, что не будет излучен ни один квант k, λ .

Вероятность того, что вообще не родится ни одного кванта ни в каком состоянии, равна

$$W_0 = \prod_{k\lambda} w_0^{k\lambda} = \exp \left[-\sum_{k\lambda} \frac{4\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2 \right].$$

Для вычисления W_0 нужно найти сумму

$$\sum_{k\lambda} \frac{4\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2 = \sum_{\lambda} 4\pi (q\eta_{\lambda})^2 \int \frac{\omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi)^3 c^3 \omega^3}. \quad (1.49)$$

Мы видим, что при малых частотах это выражение логарифмически расходится. Следовательно, $W_0 = 0$, т. е. любое торможение всегда будет сопровождаться излучением мягких квантов. Вычислим матричный элемент

$$C_n = \int \chi_n(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ$$

для произвольных n . Осцилляторная волновая функция $\chi_n(Q)$ имеет вид

$$\chi_n(Q) = \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left(-\frac{1}{2} \omega Q^2 \right) H_n(\sqrt{\omega} Q),$$

где H_n — полиномы Эрмита. Поэтому

$$C_n = \frac{\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \int \exp \left[-\frac{1}{2} \omega Q^2 - \frac{1}{2} \omega (Q - \delta)^2 \right] H_n(\sqrt{\omega} Q) dQ.$$

Этот интеграл легко вычислить, используя производящую функцию полиномов Эрмита

$$\exp(-t^2 + 2t\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(\xi).$$

В результате получается

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2\right), \quad (1.50)$$

где

$$\alpha^2 = \frac{1}{2} \omega \delta^2 = \frac{4\pi}{\omega^3} (q\eta)^2.$$

Вероятность испускания квантов с различными k, λ равна произведению квадратов выражений вида (1.50), т. е.

$$W = \exp\left[-\sum_{k\lambda} \alpha_{k\lambda}^2\right] \prod_{k\lambda} \frac{(\alpha_{k\lambda})^{2n_{k\lambda}}}{(n_{k\lambda})!}.$$

Найдем среднее число квантов, излученных при торможении:

$$\begin{aligned} \bar{n}_{k\lambda} &= \sum_{n_{k\lambda}} n_{k\lambda} w_n^{k\lambda} = \exp[-\alpha_{k\lambda}^2] \sum_{n_{k\lambda}} \frac{(\alpha_{k\lambda})^{2n_{k\lambda}}}{(n_{k\lambda})!} n_{k\lambda} = \\ &= \alpha_{k\lambda}^2 = \frac{4\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2. \end{aligned}$$

Таким образом, для вероятности испускания n квантов типа k, λ мы получаем следующую формулу:

$$w_n^{k\lambda} = \frac{(\bar{n}_{k\lambda})^{n_{k\lambda}}}{(n_{k\lambda})!} \exp(-\bar{n}_{k\lambda}), \quad (1.51)$$

которая совпадает с распределением Пуассона.

Вероятность испускания одного кванта данного типа, как видно из (1.51), равна

$$w_1^{k\lambda} = \bar{n}_{k\lambda} \exp(-\bar{n}_{k\lambda}).$$

При $\bar{n}_{k\lambda} \ll 1$ получаем $w_1^{k\lambda} \approx \bar{n}_{k\lambda}$. Это выражение совпадает с результатом обычной теории возмущений.

Из (1.49) мы видим, что сечение чисто упругого рассеяния строго равняется нулю. На опыте под упругим рассеянием понимают рассеяние, при котором энергия излученных квантов меньше некоторой величины E_1 , которая определяется точностью измерения. Наблюдаемое сечение рассеяния равно

$$\sigma_{\text{набл}} = \sigma_0 W_0'.$$

Здесь σ_0 — вычисленное сечение упругого рассеяния без учета излучения, W_0' — вероятность того, что не излучено ни одного кванта с энергией, большей E_1 . Как мы видели,

$$W_0' = \exp \left[- \int_{E_1}^E \frac{4\pi}{\omega^3} (q\eta_{k\lambda})^2 \frac{\omega^2 d\omega}{c^3 (2\pi)^3} \right] = \\ = \exp \left[- 4\pi \frac{2}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{q^2}{c^3} \ln \frac{E}{E_1} \right]. \quad (1.52)$$

В качестве верхнего предела мы взяли энергию электрона, хотя предположение о мягкости квантов нарушается уже при меньших энергиях. Если $\ln (E/E_1)$ достаточно велико, то это внесет малую ошибку.

Сечение излучения произвольного числа квантов любого типа равно

$$\sigma = \sigma_0 \sum_n W_n = \sigma_0.$$

Если бы мы пользовались теорией возмущений, то получились бы

$$w_1^{k\lambda} = \frac{4\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2, \\ W_1 = \sum_{k\lambda} w_1^{k\lambda} = \frac{4\pi \cdot 2q^2}{(2\pi)^3 c^3} \int_0^E \frac{d\omega}{\omega},$$

т. е. выражение, расходящееся на нижнем пределе. Эта расходимость, связанная с незаконным применением теории возмущений, называется инфракрасной расходимостью («инфракрасной катастрофой»).

Лэмбовское смещение. Электрон атома, взаимодействуя с нулевыми колебаниями электромагнитного поля, дрожит на своей орбите. Вследствие этого его заряд размазывается в пространстве и взаимодействие с кулоновским полем ядра ослабевает. Таким образом, уровни энергии из-за взаимодействия с нулевыми колебаниями повышаются. Это явление называется лэмбовским смещением. Оценим величину смещения.

Пусть δ — отклонение электрона от равновесного положения из-за взаимодействия с нулевыми колебаниями.

Тогда изменение потенциала взаимодействия равно

$$H' = V(\mathbf{r} + \delta) - V(\mathbf{r}) = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \delta_i \delta_j \\ (i, j = x, y, z).$$

Здесь $\mathbf{r}$ — координата электрона относительно ядра. Усредним это выражение по дрожанию электрона. Тогда $\bar{\delta} = 0$, а $\bar{\delta}_x^2 = \bar{\delta}_y^2 = \bar{\delta}_z^2 = \frac{1}{3} \bar{\delta}^2$. Следовательно,

$$H' = \frac{1}{6} \bar{\delta}^2 \Delta V.$$

Итак, для определения величины лэмбовского смещения необходимо знать средний квадрат амплитуды дрожания электрона $\bar{\delta}^2$.

Уравнение движения электрона в поле нулевых колебаний $\mathcal{E}$ для оценок можно записать в виде

$$\ddot{\delta} + \omega_0^2 \delta = -\mathcal{E},$$

где ω_0 — частота обращения электрона.

Разложим в ряд Фурье отклонение электрона δ и поле нулевых колебаний $\mathcal{E}$:

$$\delta = \sum_{k\lambda} \delta_{k\lambda} e^{-i\omega_{k\lambda} t}, \quad \mathcal{E} = \sum_{k\lambda} \mathcal{E}_{k\lambda} e^{-i\omega_{k\lambda} t}.$$

При этом мы предположили, что $k\delta \ll 1$. Ниже мы в этом убедимся.

Уравнение движения электрона в фурье-представлении приобретает вид

$$(-\omega_0^2 + \omega_{k\lambda}^2) \delta_{k\lambda} = \mathcal{E}_{k\lambda}.$$

Отсюда

$$\delta_{k\lambda} = \mathcal{E}_{k\lambda} \left(\frac{1}{\omega_{k\lambda} - \omega_0} + \frac{1}{\omega_{k\lambda} + \omega_0} \right) \frac{1}{2\omega_{k\lambda}}.$$

Первое слагаемое в правой части соответствует поглощению, а второе — испусканию квантов. При квантовомеханическом подходе эту формулу нужно модифицировать следующим образом (см. стр. 51):

$$\delta_{k\lambda} = \mathcal{E}_{k\lambda} \left(\frac{\sqrt{n_{k\lambda}}}{\omega_{k\lambda} - \omega_0} + \frac{\sqrt{n_{k\lambda} + 1}}{\omega_{k\lambda} + \omega_0} \right) \frac{1}{2\omega_{k\lambda}},$$

где $n_{k\lambda}$ — число квантов. В рассматриваемом случае $n_{k\lambda} = 0$, следовательно,

$$\delta_{k\lambda} = \frac{1}{2\omega_{k\lambda} (\omega_{k\lambda} + \omega_0)} \mathcal{E}_{k\lambda}.$$

Средний квадрат амплитуды дрожания $\bar{\delta}^2$ равен

$$\bar{\delta}^2 = \sum_{k\lambda} \overline{\delta_{k\lambda}^2} = \sum_{k\lambda} \frac{\mathcal{E}_{k\lambda}^2}{4\omega_{k\lambda}^2 (\omega_{k\lambda} + \omega_0)^2}.$$

Найдем $\mathcal{E}_{k\lambda}^2$. Энергия нулевых колебаний типа $k\lambda$ равна

$$E_{k\lambda} = \int \frac{\mathcal{E}_{k\lambda}^2}{4\pi} dV = \frac{\mathcal{E}_{k\lambda}^2}{4\pi} = \frac{1}{2} \omega_{k\lambda}$$

(нормировочный объем равен 1). Отсюда $\mathcal{E}_{k\lambda}^2 = 2\pi\omega_{k\lambda}$; следовательно,

$$\bar{\delta}^2 = \frac{\pi}{2} \sum_{k\lambda} \frac{1}{\omega_{k\lambda} (\omega_{k\lambda} + \omega_0)^2}.$$

Заменим суммирование по k интегрированием:

$$\sum_{k\lambda} = 2 \int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{\omega^2 d\omega}{c^3}$$

(множитель 2 соответствует суммированию по двум поляризациям кванта).

Тогда получаем

$$\bar{\delta}^2 = \frac{1}{2\pi c^3} \int \frac{\omega d\omega}{(\omega + \omega_0)^2} \sim \frac{1}{c^3} \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_0},$$

где $\omega_{\max}$ определяется условием нерелятивистского движения электрона в поле нулевых колебаний. Действительно, если электрон при дрожании приобретает релятивистский импульс, то в уравнение движения войдет релятивистская масса и $\delta_{k\lambda}$ будет уменьшена. Поэтому интеграл обрезается условием $k \ll c$, $\omega \ll c^2$. При этом величина, которой мы пренебрегли, $k\delta \sim c^{-1/2} \ll 1$. Так как $\sqrt{\bar{\delta}^2}$ логарифмически зависит от $\omega_{\min}$ и $\omega_{\max}$, то неточность в их определении несущественна.

Смещение электронного терма в первом порядке теории возмущений дается диагональным матричным элементом

возмущения H' по состоянию электрона Ψ_n , т. е.

$$\delta E = \frac{1}{6} \bar{\delta}^2 \int \Psi_n \Delta V \Psi_n dr = \frac{1}{6} \bar{\delta}^2 \int \Psi_n 4\pi \rho \Psi_n dr,$$

где ρ — плотность заряда. Так как заряд ядра сосредоточен в области, малой по сравнению с радиусом электронной орбиты, то электронную волновую функцию можно взять в начале координат. Интеграл $\int \rho dr$ равен заряду ядра Z . Итак,

$$\delta E = \frac{\pi Z}{6} \bar{\delta}^2 |\Psi_n(0)|^2 \sim \frac{Z}{c^3} |\Psi_n(0)|^2 \ln \frac{c^2}{\omega_0},$$

т. е. лэмбовское смещение определяется значением волновой функции электрона в начале координат.

Таким образом, смещение имеет заметную величину лишь для s -электронов, так как только для них отсутствует центробежный барьер и электрон может находиться в начале координат. Смещение электронных термов, обладающих угловым моментом, будет значительно меньшим.

Лэмбовское смещение приводит к расщеплению термов $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ водородоподобного атома. Согласно сказанному выше уровень $2p_{1/2}$ смещается значительно слабее, чем $2s_{1/2}$. Так как $|\Psi_{2s}(0)|^2 = Z^3/8\pi$, то $\delta E = C_1 \frac{Z^4}{c^3} \ln \frac{c^2}{Z^2}$. (Точный расчет дает $C_1 = 1/6\pi$).

Асимптотический характер рядов в квантовой электродинамике. В квантовой электродинамике используют теорию возмущений по взаимодействию заряженных частиц с полем. Действительно, ряды теории возмущений содержат безразмерный малый параметр $e^2/\hbar c \approx 1/137$.

Покажем, что эти ряды асимптотические, т. е. расходятся при увеличении числа членов. Существует оптимальное число членов ряда, которое лучше всего изображает изучаемый процесс. Ниже это число будет оценено.

Для этого прежде всего убедимся, что физические величины как функции e^2 имеют особую точку при $e^2 = 0$ и, следовательно, не могут быть разложены в ряд по степеням e^2 .

В качестве примера рассмотрим энергию вакуума (Дайсон, 1952). Если бы не было особой точки при $e^2 = 0$, то энергия вакуума не зависела бы от способа стремления e^2 к нулю. Пусть энергия вакуума, найденная по теории возмущений, стремится к E_0 . К какой величине стремится

энергия вакуума, когда $e^2 \rightarrow 0$ со стороны отрицательных значений? Рассмотрим при $e^2 < 0$ рождение в вакууме N электрон-позитронных пар. При $e^2 < 0$ электроны (так же как и позитроны) притягиваются друг к другу. Определим, при каком N процесс образования пар энергетически выгоден. Пусть электронное и позитронное облака разошлись на достаточно большое расстояние друг от друга, так что отталкиванием между ними можно пренебречь. Энергию каждого из этих облаков можно оценить по методу Томаса — Ферми. Находим, что выигрыш в энергии — $E \sim N^{7/3}$ (см. стр. 39). Проигрыш в энергии составляет $2mc^2$ на каждую электрон-позитронную пару, а для всех частиц $2mc^2N$. Следовательно, если $N^{7/3} > c^2N$, т. е. если $N > c^{3/2}$, то рождение электрон-позитронных пар оказывается выгодным.

При $N \sim c^{3/2}$ величина томас-фермиевского потенциала $\phi \sim c^2$, поэтому нужно выяснить, какой результат получится в релятивистском случае. Рассмотрим для простоты ультрарелятивистский предел. В этом случае $p_0 \sim \phi/c$, следовательно (стр. 38), $\phi/l^2 \sim (\phi/c)^3$, откуда $\phi l \sim c^{3/2}$. Так как $N \sim l^3\phi/l^2$, то получаем $N \sim \phi l \sim c^{3/2}$, т. е. ту же оценку, что и в нерелятивистском случае. Энергия системы при этом $E \sim Nc^2 - N\phi \sim c^{7/2} - c^3/l$, т. е. может быть неограниченно понижена уменьшением l . Мы получили, что электромагнитный вакуум при $e^2 < 0$ оказывается неустойчивым. Так как при $e^2 > 0$ он устойчив, то это означает, что имеется особая точка при $e^2 = 0$.

Рождение N электрон-позитронных пар соответствует N -му порядку теории возмущений. Найденное число $N \sim c^{3/2}$ указывает порядок числа членов теории возмущений, начиная с которого будет сказываться особая точка при $e^2 = 0$. Учет более высоких порядков теории возмущений не улучшит, а ухудшит результат.

Поскольку асимптотический характер рядов теории возмущений сказывается только на далеких членах, вопрос имеет чисто теоретический интерес.

РАЗЛИЧНЫЕ СЛУЧАИ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Размерные и модельные оценки представляют собой лишь первый этап подхода к решению физической задачи. Для доведения задачи до конца требуется найти количественное решение. Однако точное решение в задачах теоретической физики удается найти только в редких случаях. Так, например, простейшая задача квантовой механики — задача о нахождении ψ -функции одномерного уравнения Шредингера — решается точно только для нескольких видов потенциалов. Поэтому приходится довольствоваться либо приближенными аналитическими методами, либо численным решением. При этом для понимания и проверки численных методов опять-таки следует найти приближенное аналитическое решение в различных предельных случаях.

В некоторых случаях характер решения определяется аналитическими свойствами или свойствами симметрии изучаемых величин. Примеры такого рода будут рассмотрены в 4-й, 5-й, и 6-й главах. В этой главе рассматриваются различные случаи теории возмущений, когда решение может быть найдено в виде ряда по степеням какого-либо малого параметра.

Простейший случай теории возмущений соответствует слабому внешнему полю или слабому взаимодействию между частицами. Тогда роль малого параметра играет отношение энергии или потенциала взаимодействия к характерному значению энергии свободного движения. Ниже такая теория возмущений, использующая малость добавочного слагаемого в гамильтониане, рассматривается на примере задачи рассеяния.

Другой случай теории возмущений — возмущение граничных условий. Пусть, например, известно решение задачи с граничными условиями на сфере, а требуется найти решение задачи с такими же граничными условиями, но

на близкой к сфере поверхности. Производя соответствующие преобразования координат, можно привести граничные условия к условиям на сфере, но при этом за счет преобразования координат возникает поправка к гамильтониану, т. е. задача сводится к теории возмущений при слабом искажении гамильтониана.

В том случае, когда возмущение не мало, но длится в течение малого времени τ , в задаче возникает малый параметр $\xi \sim V\tau$. Этот случай теории возмущений иллюстрируется на примере ионизации при β -распаде, ионизации при ядерных столкновениях и на примере эффекта Мёссбауэра. Хорошим примером применения метода внезапных возмущений является рассмотренное в предыдущей главе рождение мягких квантов при рассеянии электрона («инфракрасная катастрофа»).

Обратный предельный случай осуществляется, когда возмущение изменяется за времена много большие, чем характерные периоды рассматриваемой системы (адиабатическое приближение). В этом случае требуется найти решение вспомогательной задачи о движении системы при фиксированном возмущении. Роль малого параметра играет величина $\xi \sim \frac{1}{\omega\tau}$, где ω — характерная частота системы, а τ — время существенного изменения возмущения.

Классический пример адиабатического возмущения — это теория молекулы. Сначала решается вспомогательная задача о движении электронов при фиксированном положении ядер. Затем определяется решение с учетом движения ядер в предположении малости отношения $\omega_{\text{мол}}/\omega_{\text{эл}}$.

В качестве примера адиабатического приближения рассматривается также задача о рассеянии протона на атоме водорода.

Еще один эффективный приближенный метод может быть развит, когда в системе имеется несколько близких уровней. В том случае, когда возмущение мало по сравнению с расстоянием до остальных уровней, можно построить расчет, учитывающий роль близких уровней точно. Этот метод иллюстрируется на примере движения частицы в периодическом потенциале, на примере штарк-эффекта и на примере задачи об изменении времени жизни состояния $2S_{1/2}$ атома водорода в электрическом поле. В последних двух задачах роль близкого уровня играет уровень $2P_{1/2}$.

Теория возмущений сыграла большую роль в развитии теоретической физики. Она может быть использована для оценки характера решения даже в тех случаях, когда параметр разложения не мал, а порядка единицы.

Исключение составляют такие явления, которые исчезают при малом значении параметра разложения. Так, например, рассматривая потенциал взаимодействия как малую величину, нельзя ни в каком порядке теории возмущений получить функцию, описывающую связанное состояние частицы. Особенно это ясно, когда связанное состояние появляется при конечной глубине потенциальной ямы.

1. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ

Рассмотрим задачу рассеяния в случае, когда к рассеивающему потенциалу добавляется малый возмущающий потенциал. Найдем изменение амплитуды рассеяния по теории возмущений. В качестве примера изучим рассеяние заряженных частиц на атомных ядрах и вычислим добавку к амплитуде кулоновского рассеяния из-за конечности ядра.

Пусть гамильтониан системы равен

$$H = H_0 + H',$$

где H' — малая добавка, причем известно решение задачи с гамильтонианом H_0 :

$$H_0 \varphi_p = E_p \varphi_p.$$

Граничные условия, налагаемые на φ_p в случае задачи рассеяния (непрерывный спектр), могут быть двух типов:

$$\varphi_p^\pm \rightarrow e^{i p r} + \frac{f_0^\pm}{r} e^{\pm i p r}.$$

Из них физический смысл имеют лишь функции φ_p^+ , соответствующие расходящейся сферической волне, однако для вспомогательных целей бывают удобны и φ_p^- . Каждая из систем функций φ_p^+ или φ_p^- является полной ортогональной системой, т. е.

$$\int \varphi_p^{+*} \varphi_{p'}^+ d\mathbf{r} = \int \varphi_p^{-*} \varphi_{p'}^- d\mathbf{r} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

Дифференциальное уравнение Шредингера $H\Psi_p = E\Psi_p$ с граничными условиями задачи рассеяния эквивалентно интегральному уравнению

$$\Psi_p = \Phi_p^+ + \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \frac{(\Phi_{\mathbf{p}'}^- | H' | \Psi_p)}{E_p - E_{\mathbf{p}'}} \Phi_{\mathbf{p}'}^-. \quad (2.1)$$

В этом легко убедиться, действуя на (2.1) оператором $H_0 - E_p$.

Можно было бы разлагать Ψ_p по функциям Φ_p^+ , но мы далее убедимся, что функции Φ_p^- удобнее.

Подинтегральное выражение (2.1) имеет особую точку при $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$. Мы увидим, что способ обхода особой точки определяет асимптотический вид Ψ_p , т. е. ставит граничные условия. Покажем, что именно указанный на рис. 17 способ обхода

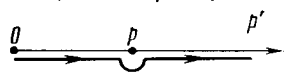


Рис. 17.

(а не обход сверху и не интеграл в смысле главного значения) дает правильные граничные условия.

Перейдем к вычислению интеграла в выражении (2.1) при $r \rightarrow \infty$. Функция $\Phi_{\mathbf{p}'}^-$ при $r \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\Phi_{\mathbf{p}'}^- \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip'rx} + \frac{f_0}{r} e^{-ip'r},$$

где

$$x = \cos \angle (\mathbf{p}'\mathbf{r}).$$

Первое слагаемое этого выражения приводит к интегралу в (2.1) вида

$$\int_{-1}^1 F(x) e^{ip'rx} dx.$$

Интегрируя по частям, имеем

$$\int_{-1}^1 F(x) e^{ip'rx} dx \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{F(1) e^{ip'r} - F(-1) e^{-ip'r}}{ip'r}.$$

Покажем, что часть этого выражения, содержащая $e^{-ip'r}$, исчезает в пределе $r \rightarrow \infty$ при интегрировании по $d\mathbf{p}'$.

Нужно оценить интеграл

$$\frac{1}{r} \int_{\Omega} \frac{dp'}{E_p - E_{p'}} e^{-ip'r} \Phi(p'). \quad (2.2)$$

Контур интегрирования изображен на рис. 17. Заменяем контур интегрирования на $C_1 + C_2$ (рис. 18), взяв δ достаточно малым, чтобы между старым и новым контуром не было особых точек. Тогда величина интеграла (2.2) не изменится.

В интеграле по контуру C_2 $p' = \xi - i\delta$, $\delta > 0$, поэтому $e^{-ip'r} = e^{-i\xi r} \cdot e^{-\delta r}$. Экспонента $e^{-\delta r}$ выносится за знак интеграла (2.2), и, следовательно, при $r \rightarrow \infty$ весь интеграл по C_2 экспоненциально мал. На участке C_1 ($p' = -it$) получаем интеграл

$$\frac{1}{r} \int_0^{\delta} \frac{e^{-rt}}{E_p - E_{it}} \Phi(t) dt. \quad (2.3)$$

При $r \rightarrow \infty$ интервал для t , существенный в подынтегральном выражении (2.3), порядка $[0, 1/r]$, следовательно, E_{it} мало в этом интервале, $E_{it} \ll E_p$. Поэтому интеграл (2.3) порядка $\frac{1}{r} \int_0^{\delta} e^{-rt} dt \sim \frac{1}{r^2}$, т. е. мал степенным образом.

По тем же соображениям мала степенным образом и часть интеграла в (2.1), содержащая слагаемое $\frac{\bar{f}_0}{r} e^{-ip'r}$ асимптотического выражения для $\bar{\varphi}_p$. В этом и состоит преимущество базисных функций $\bar{\varphi}_p$ по сравнению с φ_p^+ .

Следовательно, в (2.1) остается лишь интеграл с $e^{ip'r}$. Для его вычисления выбираем контур, изображенный на рис. 19. Как и для интеграла с $e^{-ip'r}$, в этом случае интеграл по $C_2 + C_5$ будет экспоненциально мал, а по C_1 — мал степенным образом. Интегралы по C_3 и C_4 взаимно

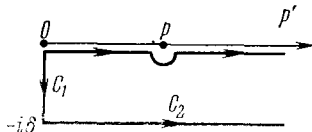


Рис. 18.

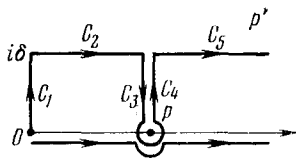


Рис. 19.

уничтожаются. Следовательно, весь интеграл сводится к вычету в точке $p' = p$:

$$\Psi_p = \varphi_p^+ + 2\pi i \frac{2\pi p'^2}{(2\pi)^3} \cdot \frac{(\varphi_{p'}^- | H' | \Psi_p)}{dE_p/dp} \frac{e^{ip'r}}{ip'r},$$

где $p' = p \frac{r}{r}$.

Итак, Ψ_p имеет нужную асимптотику:

$$\Psi_p = e^{ipr} + \frac{(f_0 + f)}{r} e^{ipr},$$

причем

$$f = - \frac{p}{2\pi v} (\varphi_{p'}^- | H' | \Psi_p^+) \Big|_{p'=p} \frac{r}{r}. \quad (2.4)$$

Для нерелятивистских частиц можно заменить $p/v = m$.

В случае свободного движения φ_p^+ и φ_p^- — плоские волны, $f_0 = 0$, и мы получаем амплитуду рассеяния в так называемом борновском приближении:

$$f_B = - \frac{p}{2\pi v} \int H'(r') e^{iqr'} dr',$$

где

$$\hat{q} = p - p \frac{r}{r}$$

— импульс, передаваемый при рассеянии: $|q| = 2p \sin \frac{\theta}{2}$, а θ — угол рассеяния.

Для нахождения последующих итераций удобно переформулировать интегральное уравнение (2.1) для волновой функции в соответствующее интегральное уравнение для амплитуды рассеяния f .

Используя (2.1) и (2.4), находим:

$$f(p', p) = f_1(p', p) - \frac{2\pi v}{p} \int \frac{g(p', p'') f(p'', p)}{E_p - E_{p''}} \frac{dp''}{(2\pi)^3}, \quad (2.5)$$

где

$$f_1(p', p) = \frac{-p}{2\pi v} \int \varphi_{p'}^* H' \varphi_p^+ dr,$$

$$g(p', p) = \frac{-p}{2\pi v} \int \varphi_{p'}^* H' \varphi_p^- dr.$$

В этом уравнении p и p' — свободные параметры. Сечение рассеяния определяется величиной $|f(p', p)|^2$ при $|p'| = |p|$.

Найдем критерий применимости теории возмущений в непрерывном спектре. Принцип отыскания критерия любого приближенного расчета состоит в том, что приближенно вычисленная физическая величина должна быть велика по сравнению с поправкой к ней от следующего порядка приближения.

В первом порядке теории возмущений

$$f = f_1 = -\frac{p}{2\pi v} \int \varphi_p^{-*} H' \varphi_p^+ dr'.$$

Во втором порядке теории возмущений из (2.1) имеем

$$f_2 = -\frac{p}{2\pi v} \int \varphi_p^{-*} H' \Psi_p^{(1)} dr' \sim m \int \varphi_p^{-*} H' \frac{f_1}{r'} e^{ipr'} dr'.$$

Условие $f_2/f_1 \ll 1$ служит критерием применимости теории возмущений.

Пусть a — порядок величины области пространства, в которой возмущающее поле $H'(r)$ заметно отлично от нуля. Рассмотрим сначала случай $pa \lesssim 1$. Тогда функции $\varphi_p^\pm(a)$ по порядку величины равны единице. Следовательно, амплитуда f_1 порядка $H'(a) a^3$ и слабо зависит от угла рассеяния. Поэтому $f_2/f_1 \sim H' a^2$ и критерий теории возмущений имеет вид

$$H' a^2 \ll 1.$$

Рассмотрим теперь случай $pa \gg 1$. Более подробно этот случай исследован в 3.1. Рассеяние в этом предельном случае больших энергий резко анизотропно и направлено вперед. Действительно, в выражении (2.4) величина

$$\varphi_p^{-*} \varphi_p^+ \sim e^{iqr} \sim e^{ipa \sin \frac{\theta}{2}}$$

сильно осциллирует при $pa \gg 1$ для всех углов рассеяния θ , кроме $\theta \lesssim 1/pa \ll 1$. Для углов рассеяния $\theta \lesssim 1/pa$ величина $\varphi_p^{-*}(a) \varphi_p^+(a)$ по порядку величины равна единице и амплитуда рассеяния имеет оценку

$$f_1(\theta) \underset{\theta \lesssim 1/pa}{\sim} H'(a) a^3.$$

Таким образом, для этой области углов критерий применимости теории возмущений остается тем же, что и при малых импульсах.

Для углов $\theta \gg 1/pa$ амплитуда $f(\theta)$ существенно уменьшается из-за осцилляции волновых функций φ_p^+ .

Рассеяние заряженных частиц на атомном ядре. В качестве примера рассмотрим рассеяние заряженных частиц на атомном ядре. Предположим, что частицы взаимодействуют только с электрическим полем ядра (как, например, электроны). Будем считать, что заряд ядра равномерно распределен по его объему. Тогда потенциальная энергия частицы:

$$V = \begin{cases} -\frac{Z}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right), & 0 < r < R, \\ -\frac{Z}{r}, & r > R. \end{cases}$$

Здесь Z — заряд ядра, R — радиус ядра. Следовательно, возмущение имеет вид

$$H' = \begin{cases} -\frac{Z}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) + \frac{Z}{r}, & 0 < r < R, \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

Дополнительная амплитуда рассеяния в первом порядке по H' равна

$$f_1 = -\frac{1}{2\pi} \int \varphi_{p'}^* H' \varphi_p^+ dr \approx -\frac{1}{2\pi} \varphi_{p'}^*(0) \varphi_p^+(0) \int H' dr.$$

Действительно, H' изменяется на расстоянии порядка R , а φ_p — на расстоянии порядка $1/p$. Для не слишком больших скоростей электронов $pR \ll 1$ (в атомных единицах $R \lesssim 10^{-4}$). Поэтому в выражении для f функции $\varphi_{p'}^+$ и φ_p^+ можно выносить из-под знака интеграла в точке $r = 0$.

Вычисление дает

$$\int H' dr = \frac{2\pi Z R^2}{5}.$$

Следовательно,

$$f_1 = -\frac{Z R^2}{5} \varphi_{p'}^*(0) \varphi_p^+(0).$$

Кулоновские нерелятивистские волновые функции $\varphi_p^\pm(0)$

равны *): для поля отталкивания

$$\varphi_p^{\pm}(0) = \frac{1}{V(2\pi)^3} e^{-\pi/2p} \Gamma(1 \pm i/p),$$

для поля притяжения

$$\varphi_p^{\pm}(0) = \frac{1}{V(2\pi)^3} e^{\pi/2p} \Gamma(1 \mp i/p),$$

где $\Gamma(1 \pm i/p)$ — гамма-функция. Обычно исследуется рассеяние электронов с импульсами, много большими импульсов атомных электронов. Тогда $\Gamma(1 \pm i/p) \approx 1$.

Окончательно получаем

$$f_1 = -\frac{1}{80\pi^3} \frac{ZR^2}{a_0} e^{\pm 2\pi/p}, \quad (2.6)$$

где знак минус относится к потенциалу отталкивания, а плюс — к потенциалу притяжения; a_0 — боровский радиус.

Дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega$ равно

$$d\sigma/d\Omega = |f_0 + f_1|^2,$$

где f_0 — амплитуда кулоновского рассеяния. Поскольку f_1 не зависит от угла рассеяния, а f_0 убывает с увеличением угла рассеяния, то учет конечности радиуса ядра существен при больших углах рассеяния.

Критерий применимости теории возмущений в этом случае ($pR \ll 1$) — это $H'R^2 \ll 1$ или $ZR \ll 1$; он выполняется для всех реальных ядер.

2. ВОЗМУЩЕНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

В этом разделе рассматривается случай, когда возмущение наложено на граничные условия. Преобразование координат позволяет привести граничные условия к невозмущенному виду. Однако оно изменяет выражение для гамильтониана системы. Это изменение гамильтониана и есть возмущающий потенциал, влияние которого можно рассмотреть с помощью обычной теории возмущений. Теория поясняется на примере расчета одночастичных энергетических уровней деформированного ядра.

*) Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 603.

Пусть нам известно решение стационарной (или нестационарной) задачи с гамильтонианом $H(x)$ и граничным условием на некоторой поверхности S_0 :

$$\alpha\Psi + \beta\Psi' |_{S_0} = 0$$

(Ψ' — производная по нормали к S_0). Требуется найти решение задачи с тем же гамильтонианом $H(x)$, но с граничным условием

$$\alpha\Psi + \beta\Psi' |_S = 0,$$

причем поверхность S близка к S_0 (эта близость и есть малый параметр в задаче). Для решения задачи следует найти такое преобразование координат $x_i = f_i(x'_j)$, что $S(x) = S_0(x')$, т. е. в новых переменных уравнение поверхности прежнее. Иными словами, если уравнение поверхности S_0 есть $\Phi_0(x_j) = 0$, а $S - \Phi(x_j) = 0$, то должно быть

$$\Phi(f_i(x'_j)) = \Phi_0(x'_j).$$

Гамильтониан $H(x_i) = H(f_i(x'_j))$ в новых переменных изменяется. Мы можем записать его в виде

$$H(x'_j) + H'(x'_j),$$

где $H'(x'_j) = H(f_i(x'_j)) - H(x'_j)$ и есть возмущение. Далее применима уже обычная теория возмущений.

Энергетические уровни деформированного ядра. Пусть известны стационарные уровни энергии в сферическом ящике, а нужно найти их в эллипсоидальном ящике (стенки считаем бесконечно высокими). Уравнение поверхности S_0 имеет вид

$$\Phi_0(x_j) = 0: \quad \sum_{j=1}^3 x_j^2 - R^2 = 0,$$

а уравнение поверхности S есть

$$\Phi(x_j) = 0: \quad \sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{a_j^2} - 1 = 0.$$

Введем новые переменные:

$$x_j = \frac{a_j x'_j}{R}.$$

Тогда $\Phi(f_i(x'_j)) = \Phi_0(x'_j)$. При этом изменяется оператор кинетической энергии частицы:

$$T(x_i) = -\frac{1}{2M} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = -\frac{R^2}{2M} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{a_i^2} \frac{\partial^2}{\partial x_i'^2}.$$

Следовательно, возмущение имеет вид

$$H'(x'_i) = -\frac{1}{2M} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{R^2}{a_i^2} - 1 \right) \frac{\partial^2}{\partial x_i'^2}.$$

Оно мало, если все a_i близки к R .

Рассмотрим эллипсоидальную деформацию ядра, считая эллипсоид двухосным (с полуосями a и b). Параметром деформации называется величина

$$\beta = 2 \frac{a-b}{a+b}.$$

Считаем, что объем ядра не меняется при его деформации, т. е. $ab^2 = R^3$. Если написать

$$a = R(1 + \delta), \quad b = R(1 - \delta_1),$$

где $\delta, \delta_1 \ll 1$, то в первом приближении из $ab^2 = R^3$ получим $\delta - 2\delta_1 = 0$, т. е.

$$\beta = 2 \frac{R(1 + 2\delta_1) - R(1 - \delta_1)}{2R} \approx 3\delta_1,$$

или

$$a \approx R \left(1 + \frac{2}{3} \beta \right), \quad b \approx R \left(1 - \frac{1}{3} \beta \right).$$

Тогда возмущение H' принимает следующий вид:

$$H' \approx -\frac{\beta}{3M} \left(\Delta - 3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).$$

Пусть ϵ_{nlj}^0 — энергия частиц без учета деформации ядер (от магнитного квантового числа она не зависит в силу сферической симметрии поля). С учетом деформации в первом порядке теории возмущений получаем

$$\epsilon_{nljm} = \epsilon_{nlj}^0 + (\varphi_{nljm}^{(0)} | H' | \varphi_{nljm}^{(0)}).$$

В результате расчета находим

$$\varepsilon_{nljm} = \varepsilon_{nlj}^0 \left[1 + \beta \left(\frac{m^2}{j(j+1)} - \frac{1}{3} \right) \right]. \quad (2.7)$$

Зависимость ε_{nljm} от β схематически изображена на рис. 20.

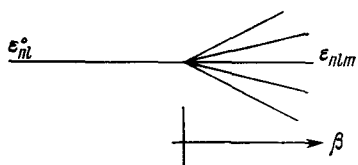


Рис. 20.

Заметим, что $\frac{1}{2j+1} \sum_m \varepsilon_{nljm} = \varepsilon_{nlj}^0$, т. е. центр тяжести мультиплетта не смещается при деформации ядра.

В приведенном выше расчете предполагалось, что деформация достаточно мала, чтобы не разрушать спин-орбитальную связь. Тогда уровни определяются полным моментом j (см. задачу 2).

ЗАДАЧИ

1. Вычислить ε_{nlm} в отсутствие спин-орбитальной связи ($\Psi_{nlm} = R_{nl}Y_{lm}$).

Ответ.
$$\varepsilon_{nlm} = \varepsilon_{nl}^0 \left\{ 1 + \beta \left[\frac{m^2 - \frac{1}{4}}{\left(l - \frac{1}{2}\right) \left(l + \frac{3}{2}\right)} - \frac{1}{3} \right] \right\}.$$

2. Вычислить ε_n при произвольном соотношении между спин-орбитальным взаимодействием и энергией деформации

$$H = H_0 + ASl + H'.$$

Ответ.
$$\varepsilon_{nljm}^{+,-} = \varepsilon_{nl}^{+,-} + \beta \varepsilon_{nl}^0 \left[\frac{m_j^2}{L} - \frac{1}{3} \right] \pm$$

$$\pm \left\{ \sqrt{\frac{A^2}{4} \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \beta \varepsilon_{nl}^0 \frac{m_j}{L} \left[\beta \varepsilon_{nl}^0 \frac{m_j}{L} - Am_j \right]} - \right.$$

$$\left. - \frac{A}{2} \left(l + \frac{1}{2}\right) \right\},$$

где $\varepsilon_{nl}^{+,-} = \varepsilon_{nl}^0 + \frac{A}{2} \left[-\frac{1}{2} \mp \left(l + \frac{1}{2}\right) \right]$, знак $\pm$ соответствует $j = l \pm \frac{1}{2}$. (В ответе для сокращения записи мы ввели обозначение $L = (l-1/2)(l+2/3)$.)

3. ВНЕЗАПНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ

В рассмотренных до сих пор примерах малым параметром задачи было относительное изменение гамильтониана системы. Изучим случай, когда малым параметром является время действия возмущения, но само возмущение не мало.

Ионизация при β -распаде — один из таких примеров. В этом случае скорость β -распадного электрона много больше скоростей атомных электронов. Поэтому изменение заряда ядра — внезапное событие для них. Другой пример — ионизация при ударе быстрой частицы о ядро. В этом случае внезапным событием для атомных электронов служит отдача ядра.

Рассмотрим систему, волновая функция которой подчиняется уравнению Шредингера $i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi$ с гамильтонианом

$$H = \begin{cases} H_1(r), & t < 0, \\ H_2(r), & t > \tau. \end{cases}$$

Предположим, что гамильтониан системы сильно изменяется за короткое время τ . Введем полную систему функций гамильтониана H_2 :

$$H_2 \varphi_n^{(2)} = \varepsilon_n^{(2)} \varphi_n^{(2)}$$

и разложим решение задачи Ψ по функциям $\varphi_n^{(2)}$:

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n^{(2)} e^{-i\varepsilon_n^{(2)}t}. \quad (2.8)$$

Запишем гамильтониан H в виде $H = H_2 + (H - H_2) = H_2 + V$. Тогда

$$i \frac{da_n}{dt} = \sum_m V_{nm}(t) e^{-i[\varepsilon_m^{(2)} - \varepsilon_n^{(2)}]t} a_m(t). \quad (2.9)$$

Действительно, если временно обозначить $b_n(t) = a_n(t) e^{-i\varepsilon_n^{(2)}t}$, то фактически разложение $\Psi(t) = \sum_n b_n(t) \varphi_n^{(2)}$ означает переход от координатного к энергетическому представлению гамильтониана H_2 . Уравнение

Шредингера в новом представлении имеет такой вид:

$$i \frac{\partial b_n}{\partial t} = \sum_m [\epsilon_n^{(2)} \delta_{nm} + V_{nm}(t)] b_m,$$

откуда сразу же получаем уравнение (2.9).

Интегрируя полученное уравнение, имеем

$$a_n(t) - a_n(0) = -i \sum_m \int_0^t V_{nm} a_m(t) e^{-i[\epsilon_m^{(2)} - \epsilon_n^{(2)}]t} dt. \quad (2.10)$$

Матричный элемент V_{nm} обращается в нуль при $t \gg \tau$. Предположим, что $(\epsilon_n^{(2)} - \epsilon_m^{(2)}) \tau \ll 1$. Тогда экспонента под интегралом приближенно равна единице. Следовательно, для того чтобы пользоваться последовательными приближениями, должно выполняться условие $V\tau \ll 1$ (возмущение не является малым, но оно действует короткое время).

В нулевом приближении из (2.10) имеем $a_n^{(0)}(t) = a_n(0)$. Заменяя в правой части уравнения (2.10) в первом приближении $a_m(t)$ на $a_m(0)$ и учитывая (2.8), получим

$$\begin{aligned} a_n^{(1)}(t) &= -i \sum_m \int_0^t (\varphi_n^{(2)} | V | \varphi_m^{(2)}) a_m(0) dt = \\ &= -i \int_0^t (\varphi_n^{(2)} | V | \Psi(0)) dt. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Предположим, что начальное состояние $\Psi(0)$ было одной из собственных функций H_1 , т. е.

$$\Psi(0) = \varphi_{n_0}^{(1)} = \sum a_n(0) \varphi_n^{(2)}.$$

Следовательно, $a_n(0) = (\varphi_{n_0}^{(1)} | \varphi_n^{(2)})$. Итак, в нулевом приближении вероятность перехода в состояние $\varphi_n^{(2)}$ есть

$$W_{nn_0} = |(\varphi_{n_0}^{(1)} | \varphi_n^{(2)})|^2. \quad (2.12)$$

В пространстве векторов $\Psi(t)$ с базисом φ_n внезапное возмущение соответствует сильному изменению базиса: $\varphi_n^{(1)} \rightarrow \varphi_n^{(2)}$, при малом изменении волновой функции: $\Psi(t) \approx \Psi(0)$.

Ионизация атомов при β -распаде. Расчет ионизации атома при β -распаде сильно упрощается, если использовать тот факт, что скорость β -распадного электрона много больше скоростей атомных электронов. Покажем, что ионизация вызывается изменением заряда ядра, а непосредственным взаимодействием атомного и β -распадного электронов можно пренебречь.

Сначала оценим вероятность электронного перехода, вызываемого непосредственным взаимодействием. Согласно теории возмущений она равна

$$W = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty V_{nn_0} e^{i\omega_{nn_0} t} dt \right|^2. \quad (2.13)$$

Здесь V_{nn_0} — матричный элемент энергии взаимодействия, а ω_{nn_0} — частота перехода.

Оценим это выражение. Величина ω_{nn_0} имеет порядок атомных частот. Время пролета β -распадного электрона τ много меньше атомных периодов, т. е. $\omega_{nn_0} \tau \ll 1$. Поэтому в (2.13) можно заменить $e^{i\omega_{nn_0} t} \rightarrow 1$. Взаимодействие V β -электрона с атомным электроном имеет порядок величины e^2/a , где a — величина порядка атомных размеров. Так как при β -распаде электрон вылетает из атома со скоростью порядка скорости света c , то время вылета $\tau \sim a/c$. Следовательно, вероятность W имеет оценку:

$$W \sim \frac{1}{\hbar^2} V^2 \tau^2 \sim \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \ll 1. \quad (2.14)$$

Вычислим теперь вероятность ионизации вследствие изменения заряда ядра. Как мы только что видели, волновая функция атомных электронов мало меняется за время вылета β -распадного электрона. Поэтому вероятность ионизации электрона, находившегося в состоянии Ψ_0^Z в поле ядра с зарядом Z , согласно (2.12) равна

$$W_{0,E} = |(\Psi_0^Z | \Psi_E^{Z+1})|^2. \quad (2.15)$$

Здесь Ψ_E^{Z+1} — волновая функция вылетевшего электрона с энергией $E > 0$ в поле ядра с зарядом $Z + 1$. Полная вероятность ионизации из-за изменения заряда ядра равна

$$W_0 = \int_0^\infty W_{0,E} dE. \quad (2.16)$$

Оценим (2.16). Для этого разложим функцию $f(Z_1, Z_2) = (\Psi_E^{Z_1} | \Psi_E^{Z_2})$ в ряд по разности $Z_1 - Z_2$:

$$f(Z_1, Z_2) \approx (Z_1 - Z_2) \frac{\partial f}{\partial Z_1} \Big|_{Z_1=Z_2}.$$

Производная $\frac{\partial f}{\partial Z_1} \Big|_{Z_1=Z_2} = \left(\Psi_E^{Z_1} \left| \frac{\partial \Psi_0^{Z_1}}{\partial Z_1} \right. \right) \sim \frac{1}{Z_1}$. Следовательно, $(\Psi_0^{Z_1} | \Psi_E^{Z_2}) \sim \frac{Z_1 - Z_2}{Z_1} = \frac{1}{Z_1}$, т. е.

$$W_0 \sim \frac{1}{Z^2}. \quad (2.17)$$

Отношение вероятности непосредственного взаимодействия к этой величине имеет порядок

$$\left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \ll 1.$$

Из (2.15) можно сделать заключение о правилах отбора для рассматриваемого процесса. В случае ионизации внутренних оболочек самосогласованное поле, в котором движется электрон, можно считать сферически-симметричным, следовательно, $\Psi = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Подставляя это Ψ в (2.15), получим правила отбора:

$$l_1 = l_2, \quad m_1 = m_2.$$

Для наружных оболочек эффективный заряд Z , действующий на атомные электроны, порядка единицы. Следовательно, согласно (2.17) и вероятность ионизации $W_h \sim 1$. Это подтверждается экспериментами по накоплению положительных ионов при $\beta^\pm$ -распаде.

Вероятность ионизации можно вычислить для K - и L -оболочек. В этих случаях существенна область вблизи ядра, где функции Ψ_0^Z и Ψ_E^{Z+1} можно считать водородоподобными (пользование водородоподобными функциями вносит погрешность порядка $1/Z$).

Вероятность ионизации быстро убывает, когда энергия вылетающего электрона становится много больше потенциала ионизации. Действительно, в этом случае функция Ψ_E^{Z+1} много раз осциллирует на размерах K -оболочки и интеграл (2.15) мал. Таким образом, вылетающие электроны имеют энергию между нулем и величиной порядка потенциала ионизации.

Получим вероятность ионизации для K -электрона, когда энергия вылетающего атомного электрона много больше потенциала ионизации. Радиальная волновая функция R_E^{Z+1} при больших энергиях должна совпадать с радиальной функцией свободной частицы;

$$R_E^{Z+1} \underset{E \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin kr.$$

Здесь $k = \sqrt{2E}$. Функция R_E предполагается нормированной:

$$\int_0^\infty R_E R_{E'} r^2 dr = \delta(E - E').$$

Следовательно,

$$W_{1E} = \left| \int_0^\infty R_1^Z R_E^{Z+1} r^2 dr \right|_{E \rightarrow \infty}^2 \approx \frac{2}{\pi k} \left| \int_0^\infty R_1^Z \sin(kr) r dr \right|^2.$$

Для K -электрона $R_1^Z = 2Z^{3/2} e^{-Zr}$. Следовательно, нужно вычислить интеграл $I = \int_0^\infty r e^{-Zr} \sin(kr) dr$ при $k \rightarrow \infty$. Интегрируя его по частям, получаем $I \approx 2Z/k^3$ (интеграл вычислялся в 1.1, стр. 27, и на стр. 54).

Итак, при $E \gg Z^2$ вероятность ионизации K -электрона приближенно равна:

$$W_{1E} \approx \frac{8Z^3}{\pi k} \left(\frac{2Z}{k^3} \right)^2 = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{Z^5}{E^{7/2}}.$$

Ионизация атомов при ядерных реакциях. При ядерных столкновениях с большой передачей энергии должна происходить ионизация атомов отдачи. Если скорость, приобретенная ядром, невелика, то ядро успевает увлечь электроны, и ионизация происходит только в наружных, слабо связанных оболочках. Наоборот, при больших скоростях ядро вылетает из оболочки, не увлекая ее за собой.

Вычислим вероятность ионизации при ударе нейтрона об ядро (Мигдал 1939). Время соударения нейтрона с ядром $\tau \sim R/v_n$, где R — радиус ядра, v_n — скорость нейтрона. Это время много меньше электронных периодов τ_a .

Поэтому за время столкновения электронная волновая функция практически не меняется.

Если обозначить через $v_{\text{я}}$ скорость, приобретенную ядром, то смещение l ядра за время соударения имеет порядок величины $l \sim v_{\text{я}} \tau \sim \frac{v_{\text{я}}}{v_{\text{н}}} R \sim \frac{M_{\text{н}}}{M_{\text{я}}} R < R$, т. е. l много меньше размеров электронной оболочки. Следовательно, ядро практически не смещается за время удара.

Перейдем к системе координат, в которой ядро после соударения покоится. Тогда волновая функция начального состояния преобразуется в выражение

$$\Psi_0 \rightarrow e^{i v_{\text{я}} \Sigma r_i} \Psi_0(r_1, r_2, \dots),$$

где $v_{\text{я}}$ — скорость отдачи ядра. Это выражение проще всего получить, разлагая Ψ_0 -функцию по плоским волнам и сдвигая каждый из импульсов этих волн на величину $v_{\text{я}}$. Пусть $\Psi_1(r_1, r_2, \dots)$ обозначает конечное состояние атома. Вероятность возбуждения согласно (2.12) равна

$$W = |(\Psi_1 | e^{i v_{\text{я}} \Sigma r_i} \Psi_0)|^2. \quad (2.18)$$

Критерий применимости этой формулы: $\tau \ll \tau_a$. Его можно записать также в виде $\frac{R}{v_{\text{н}}} \ll \frac{a}{v_0}$ или $v_{\text{н}} \gg \frac{R}{a} v_0$, где a — величина порядка размеров изучаемой оболочки.

Из выражения (2.18) можно получить формулу для вероятности перехода одного фиксированного электрона. Так как при $Z \gg 1$ взаимодействие между электронами мало по сравнению с полем ядра, то

$$W = W_1 W_2,$$

где W_1 — вероятность перехода рассматриваемого электрона, а W_2 — вероятность возбуждения всех остальных электронов.

Суммируя по всем конечным состояниям, получим $\sum_1 W_1 = 1$, $\sum_2 W_2 = 1$. Следовательно, вероятность перехода рассматриваемого электрона из состояния ψ_0 в состояние ψ_n равна

$$W = W_1 \sum_2 W_2 = \left| \int \psi_n e^{i v_{\text{я}} r} \psi_0 dr \right|^2. \quad (2.19)$$

Если скорость ядра много меньше скорости электрона (но $v_{\text{я}} \gg v_0 \frac{R}{a}$), то экспоненту в (2.19) можно разложить в ряд. Нулевой член разложения исчезает из-за ортогональности функций ψ_0 и ψ_n . Пусть скорость $v_{\text{я}}$ направлена по оси z . Тогда

$$W = v_{\text{я}}^2 | \langle \psi_n | z | \psi_0 \rangle |^2. \quad (2.20)$$

Наоборот, если $v_{\text{я}} \gg v_0$, то экспонента $e^{iv_{\text{я}} \Sigma r_i}$ в (2.18) [или (2.19)] быстро осциллирует. Следовательно, вероятность перехода W не мала, только если $\Psi_1 \sim e^{-iv_{\text{я}} \Sigma r_i}$, т. е., когда электроны в новой системе движутся со скоростью — $v_{\text{я}}$. В лабораторной системе координат это соответствует тому, что электронная оболочка не увлекается ядром при ударе.

Если скорость ядра $v_{\text{я}}$ больше скорости внешних электронов, но меньше скорости внутренних электронов, т. е. $1 < v_{\text{я}} < Z$, то внутренние оболочки атома увлекаются ядром, а наружные — нет. Заряд получающегося иона равен по порядку величины числу электронов на наружных оболочках.

Такие соображения позволяют оценить заряд осколков при делении. Заряд определяется как число электронов со скоростями, меньшими чем скорость осколка (см. стр. 93).

Для атома водорода и для внутренних оболочек других атомов вычисления можно довести до конца. Вероятность ионизации и возбуждения для этих случаев приводится в задачах.

Оценим полную вероятность возбуждения и ионизации W при $v_{\text{я}} \ll 1$. Из (2.20) находим

$$W = C_1 v_{\text{я}}^2,$$

где C_1 — число порядка единицы. Из решения задачи 4 (см. стр. 94) следует, что вероятность атому водорода остаться в основном состоянии равна

$$W_{00} = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4} v_{\text{я}}^2\right)^4}.$$

Отсюда находим, что для атома водорода $C_1 = 1$.

Передача энергии при вылете кванта из ядра молекулы (эффект Мёссбауэра). Предположим, что квант с энергией $\hbar\omega$ вылетает из ядра, входящего в молекулу. Если $\hbar\omega$ мало, то молекула получает слабый толчок и воспринимает отдачу как единое целое. Если $\hbar\omega$ велико, то ядро вылетает из молекулы — происходит возбуждение системы (те же соображения применимы и к металлам: при малом ω отдачу воспринимает вся кристаллическая решетка).

Оценим время вылета τ кванта из ядра; τ — это время пролета пакета радиуса $\lambda = c/\omega$ через область ядра, т. е. $\tau \sim \lambda/c = 1/\omega$. Эта оценка неверна при $\lambda < R$, где R — радиус ядра, т. е. при $\omega > c/R \sim 137 \cdot 10^4 \cdot 27 \text{ эв} \sim 40 \text{ Мэв}$.

Время τ ничтожно по сравнению с временами, характеризующими колебания и вращения молекулы. Следовательно, Ψ -функция молекулы не успевает измениться за время вылета кванта. Задача напоминает задачу об ионизации при ядерных реакциях. Волновая функция молекулы в начальный момент после испускания кванта имеет вид

$$\Psi' = \Psi(r_1, r_2, \dots) e^{iMvr_1},$$

где v — скорость отдачи, r_1 — радиус-вектор ядра, из которого вылетел квант, M — масса атома. Функция Ψ описывает основное состояние молекулы. Вероятность того, что молекула останется невозбужденной, равна

$$W_0 = |(\Psi_0 | e^{iMvr_1} | \Psi_0)|^2. \quad (2.21)$$

Если $Mvr_1 \ll 1$, то $W_0 \sim 1$, т. е. отдача воспринимается всей молекулой, возбуждения нет.

Оценим частоту γ -кванта ω , начиная с которой возбуждаются колебательные степени свободы молекулы. Как мы увидим, амплитуда колебаний имеет порядок величины $1/\sqrt[4]{M}$. Поэтому в (2.21) $r_1 \sim 1/\sqrt[4]{M}$. Следовательно, для того чтобы колебания не возбуждались, должно быть $Mv \frac{1}{\sqrt[4]{M}} \ll 1$. Так как импульс ядра $p_{\text{я}} = Mv$ равен импульсу кванта ω/c , это условие означает, что $\omega/c \ll \sqrt[4]{M}$, или $\omega \ll 137 \sqrt[4]{M}$ (в атомных единицах); в эв: $\omega \ll 137 \sqrt[4]{100 \cdot 1840 \cdot 27} \text{ эв} \sim 70 \text{ кэв}$ (здесь взято ядро с $A \sim 100$).

Критерий применимости (2.21):

$$\omega \gg \omega_{\text{кол}} \sim 1/\sqrt{M} \sim \frac{27}{\sqrt{100 \cdot 1840}} \sim 0,06 \text{ эв},$$

где $\omega_{\text{кол}}$ — колебательная частота молекулы.

Оценим теперь частоту кванта, начиная с которой возбуждаются вращательные степени свободы молекулы. Для этого рассмотрим плоский ротатор. Его волновая функция $\psi_m = e^{im\varphi}$. Вероятность перехода из состояния ψ_0 в состояние ψ_m согласно (2.21) равна

$$w_{m0} = \left| \int \psi_m e^{iMvr} \psi_0 dr \right|^2 \sim \left| \int_0^{2\pi} e^{im\varphi + iMva \cos \varphi} d\varphi \right|^2, \quad (2.22)$$

где a — величина порядка размеров молекулы.

Следовательно, для того чтобы вращательные уровни не возбуждались, необходимо, чтобы момент количества движения $\sim Mva$, сообщенный молекуле квантом, был много меньше момента количества движения ротатора m . В этом случае из (2.22) находим $w_{m0} \ll 1$ для наименьшего возбуждения ($m = 1$) получаем

$$Mva \ll 1 \quad \text{или} \quad \frac{\omega}{c} a \ll 1,$$

откуда $\omega \ll c = 137 \cdot 27 \text{ эв} \sim 4 \text{ кэв}$.

ЗАДАЧИ

1. Убедиться в том, что отдача ядра не существенна для ионизации атома при β -распаде.

2. Используя метод Томаса — Ферми, оценить заряд осколков при делении ядра, считая его равным числу электронов со скоростью, меньшей скорости осколков.

О т в е т. $Z_{\text{оск}} \sim 8$.

3. Оценить ионизацию атома из-за магнитного взаимодействия налетающего нейтрона с электроном.

О т в е т.

$$\frac{W_{\text{магн}}}{W} \lesssim \left| \frac{V_{\text{магн}} \tau}{v_{\text{н}}} \right|^2 \sim \left| \frac{\mu_{\text{н}} \mu_{\text{э}}}{a^3} \frac{R}{v_{\text{н}}^2} \right|^2 \ll \left| \frac{1}{M_{\text{н}} c^2} \frac{1}{R} \right|^2 \sim 10^{-7}.$$

4. Определить вероятность того, что при ударе нейтрона о ядро атома водорода электрон останется в основном состоянии.

$$\text{Ответ. } W_{11} = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4} v_{\text{н}}^2\right)^4}.$$

4. АДИАБАТИЧЕСКИЕ ВОЗМУЩЕНИЯ

В этом разделе рассматривается случай, когда возмущение, действующее на квантовомеханическую систему, медленно меняется со временем. При этом система успевает перестраиваться вслед за медленным изменением параметров. Такие возмущения называются адиабатическими.

В случае адиабатических возмущений удобно искать решение уравнения Шредингера в виде суперпозиции стационарных собственных функций, вычисленных при произвольных, но фиксированных значениях параметров.

Предположим, что гамильтониан $H(x, \xi)$ зависит от медленно меняющегося параметра ξ . Введем собственные функции $\varphi_m(x, \xi)$ гамильтониана $H(x, \xi)$, в которых значение ξ зафиксировано:

$$H(x, \xi) \varphi_m(x, \xi) = \varepsilon_m(\xi) \varphi_m(x, \xi). \quad (2.23)$$

Будем искать решение уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi \quad (2.24)$$

в виде

$$\Psi = \sum_m a_m(t) \varphi_m(x, \xi) \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t \varepsilon_m(\xi) dt \right\}. \quad (2.25)$$

Подставляя (2.25) в (2.24), находим

$$\frac{da_n}{dt} + \sum_m \left(\varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right) \xi a_m \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t (\varepsilon_m - \varepsilon_n) dt \right\} = 0. \quad (2.26)$$

Уравнение (2.26) удобно для нахождения последовательных приближений при малых ξ .

Именно,

$$a_n^{(0)}(t) = a_n(-\infty),$$

$$a_n^{(1)}(t) =$$

$$= - \int_{-\infty}^t dt' \sum_m \left(\varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right) \dot{\xi} a_m(0) \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{t'} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) dt' \right\}$$

(2.27)

и т. д.

Выразим $\left(\varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right)$ через матричный элемент гамильтониана H . Дифференцируя соотношение (2.23) по параметру ξ , находим

$$\frac{\partial H}{\partial \xi} \varphi_m + H \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} = \frac{d\varepsilon_m}{d\xi} \varphi_m + \varepsilon_m \frac{d\varphi_m}{d\xi}.$$

Умножая это равенство на φ_n слева и интегрируя по x , получаем

$$\left(\varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right)_{n \neq m} = \frac{\left(\varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_m \right)}{\varepsilon_m - \varepsilon_n}, \quad \left(\varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_n \right) = \frac{d\varepsilon_n}{d\xi}.$$

(2.28)

Будем предполагать, что собственные состояния φ_n не вырождены. Тогда волновые функции φ_n можно выбрать вещественными, и, следовательно, диагональный матричный элемент

$$\left(\varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial \xi} \right. \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \int \varphi_n^2 d\mathbf{r} = 0.$$

Подставляя (2.28) в (2.27), получаем

$$a_n^{(1)}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' \sum_m' \frac{\left(\varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_m \right) \dot{\xi}}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \times$$

$$\times a_m(-\infty) \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{t'} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) dt' \right\}. \quad (2.29)$$

Штрих в сумме по m означает, что в ней нет диагональных членов.

Критерий применимости адиабатической теории возмущений состоит в том, чтобы изменение гамильтониана за время порядка обратных частот системы было малым по сравнению с энергиями, соответствующими этим частотам.

Критерий применимости легко получить, если оценить отношение поправки $a_n^{(2)}(t)$ к амплитуде $a_n^{(1)}(t)$: учитывая (2.29), находим

$$\frac{a_n^{(2)}}{a_n^{(1)}} \sim \frac{\partial H}{\partial t} \frac{1}{(\varepsilon_m - \varepsilon_n)^2}. \quad (2.30)$$

Как видно из (2.30), требует отдельного рассмотрения случай, когда при некоторых значениях параметров ξ уровни энергии пересекаются. В этом случае волновую функцию следует искать в виде суперпозиции состояний, соответствующих этим пересекающимся термам.

Покажем, что если обратные собственные частоты системы ω_{mn}^{-1} много меньше времени τ , за которое существенно изменяется гамильтониан системы, то эта система, как правило, будет возбуждаться экспоненциально слабо. Действительно, выражение (2.29) для амплитуды перехода $a_n^{(1)}(t)$ сводится к фурье-компонентам от функции

$$\left(\varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_m \right) \dot{\xi} \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}.$$
 Ранее (см. 1.1) мы видели, что такие фурье-компоненты при $\omega_{mn}\tau \gg 1$ экспоненциально малы ($\sim e^{-\omega_{mn}\tau}$), если эти функции или их производные не имеют особенностей на вещественной оси.

Применение теории возмущений к экспоненциально малым выражениям требует осторожности, поскольку небольшое изменение в показателе экспоненты может скомпенсировать следующий порядок по степеням ξ . Формула (2.29) дает величину поправки с точностью до множителя порядка единицы (Дыхне, 1961).

Как будет показано (см. стр. 192), кулоновские волновые функции имеют особенность в точке $r^2 = 0$. Поэтому, например, вероятность ионизации атома пролетающей медленной частицей мала степенным образом, а не экспоненциально (см. следующий раздел).

ЗАДАЧА

Используя соотношение (2.28), вычислить $\overline{1/r^2}$ для центрально-симметричного движения.

$$\text{О т в е т. } \frac{\overline{1}}{r^2} = \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \left(\frac{\partial E}{\partial l} \right)_{n_r}.$$

Ионизация атома при пролете медленной тяжелой частицы. Оценим, как зависит вероятность ионизации атома при пролете мимо него медленной тяжелой заряженной частицы от скорости этой частицы. Для простоты будем рассматривать атом водорода. Предположим, что скорость пролетающей частицы v много меньше скорости атомного электрона, т. е. $v \ll 1$.

Энергия взаимодействия пролетающей частицы с атомным электроном имеет вид $-\frac{1}{|r - r_1|}$. Матричный элемент перехода электрона из состояния φ_0 в состояние φ_k и тяжелой частицы из состояния Ψ_p в $\Psi_{p'}$ в первом порядке теории возмущений равен:

$$M_{pp'}^{0k} = - \left(\Psi_{p'} \varphi_k \frac{1}{|r - r_1|} \varphi_0 \Psi_p \right).$$

Критерий применимости теории возмущений мы укажем позже, когда оценим этот матричный элемент.

Покажем, что функции $\Psi_p, \Psi_{p'}$ можно заменить в $M_{pp'}^{0k}$ на плоские волны. Действительно, запишем Ψ_p в виде $\Psi_p \sim e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}\chi$, где $\chi = \exp \left\{ iM \int \frac{V}{p^2} \mathbf{p} d\mathbf{r} \right\}$ (см. 3.2), V — кулоновское взаимодействие пролетающей частицы с ядром атома, M — приведенная масса частицы и ядра.

Фаза $M \int \frac{V}{p^2} \mathbf{p} d\mathbf{r}$ имеет оценку $\frac{MVa}{p} \sim \frac{1}{v}(a - \text{прицельный параметр})$. Так как $v \ll 1$, то фаза функции χ не мала. Однако фаза $\chi\chi'$, как мы сейчас убедимся, мала.

Действительно,

$$\chi\chi' = \exp \left[iM \int \frac{V}{p} \frac{\mathbf{q} d\mathbf{r}}{p} \right] = \exp \left[iM \int \frac{Vq_{\parallel}}{p^2} d\mathbf{r} \right].$$

Здесь $q_{\parallel}$ — импульс, передаваемый вдоль движения частицы. Оценим его.

Передаваемая энергия равна:

$$E_{p'} - E_p = \Delta \left(\frac{1}{2} M v^2 \right) = v \Delta p = v q_{\parallel}.$$

С другой стороны, $E_{p'} - E_p = \varepsilon_k - \varepsilon_0 \sim 1$. Следовательно, $q_{\parallel} \sim 1/v$ и

$$\chi\chi' \simeq \exp \left[iM \frac{Vq_{\parallel} a}{p^2} \right] \simeq \exp \left[i \frac{Mq_{\parallel}}{p^2} \right] \simeq \exp \left[\frac{i}{Mv^3} \right].$$

При условии $Mv^3 \gg 1$ величина $\chi\chi' \approx 1$ и замена $\Psi_p \Psi_{p'}$ на плоские волны становится оправданной.

Оценим теперь $M_{pp'}^{0k}$. Так как

$$\int e^{-iqr} \frac{1}{|r - r_1|} d\mathbf{r} = e^{-iqr_1} \frac{4\pi}{q^2}, \text{ то } M_{pp'}^{0k} \sim \frac{1}{q^2} (\varphi_0 e^{-iqr} \varphi_k).$$

Дифференциальное сечение ионизации получим, деля $|M_{pp'}^{0k}|^2$ на поток падающих частиц (он пропорционален v), умножая на δ -функцию, соответствующую закону сохранения энергии, и суммируя по возможным состояниям электрона с положительной энергией и возможным значениям p' :

$$\sigma \sim \frac{1}{v} \int \sum_k \frac{1}{q^4} |(\varphi_0 e^{-iqr} \varphi_k)|^2 \delta(E_p - E_{p'} - \varepsilon_k + \varepsilon_0) d\mathbf{p}'.$$

Величина $d\mathbf{p}' = d\mathbf{q} = 2\pi q_{\perp} dq_{\parallel} dq_{\perp}$. Интегрирование по продольным передаваемым импульсам $q_{\parallel}$ уничтожается δ -функцией:

$$\int \delta(E_p - E_{p'} - \varepsilon_k + \varepsilon_0) dq_{\parallel} = \int \delta(q_{\parallel} v - \varepsilon_k + \varepsilon_0) dq_{\parallel} = 1/v,$$

причем $q_{\parallel} = (\varepsilon_k - \varepsilon_0)/v$. Следовательно,

$$\sigma \sim \frac{1}{v^2} \int \sum_k \frac{|(\varphi_0 e^{-iqr} \varphi_k)|^2}{\left(q_{\perp}^2 + \left(\frac{\varepsilon_k - \varepsilon_0}{v} \right)^2 \right)^2} q_{\perp} dq_{\perp}.$$

Из этого выражения видно, что существенные значения $q_{\perp}$ имеют порядок $1/v$.

Оценим матричный элемент $(\varphi_0 e^{-iqr} \varphi_k)$. Он равен $\int e^{-\alpha r - iqr} d\mathbf{r}$, где α — число порядка единицы. Такая же далекая фурье-компонента оценивалась при рассмотрении

дипольного фотоэффекта, где было получено (см. стр. 55)

$$(\varphi_0 e^{-iqr} \varphi_k) \sim \frac{1}{q^4}.$$

Подставляя найденное значение матричного элемента в формулу для σ , получаем

$$\sigma \sim \frac{1}{v^2} \int \frac{q_{\perp} dq_{\perp}}{q^4 q^8}.$$

Так как $q_{\parallel} \sim q_{\perp} \sim 1/v$, то $\sigma \sim v^{10}/v^2 = v^8$.

Итак, сечение ионизации атома при пролете тяжелой медленной частицы $\sim$ восьмой степени ее скорости.

Почему оно не мало экспоненциальным образом, как это обычно бывает для адиабатического процесса? Это связано с корневой особенностью кулоновских волновых функций $e^{-\alpha r} = e^{-\alpha \sqrt{x^2+y^2+z^2}}$ по каждой из переменных при фиксированных значениях других переменных. Эта особенность может достигать вещественной оси, из-за чего и получается степенная, а не экспоненциальная малость (см. также стр. 192).

Проверим критерий применимости теории возмущений.

Так как $\epsilon_k - \epsilon_0 \sim 1$ и

$$M_{pp'}^{0k} \sim \frac{1}{q^2} (\varphi_0 e^{-iqr} \varphi_k) \sim \frac{1}{q^2} \frac{1}{q^4} \sim v^6 \ll 1,$$

то

$$M_{pp'}^{0k}/(\epsilon_k - \epsilon_0) \ll 1,$$

что и требуется для применимости теории возмущений.

Приведем в заключение условия, при которых пригодны полученные выше результаты:

$$1 \gg v^3 \gg 1/M.$$

В частности, отсюда следует, что энергия пролетающей частицы должна быть много больше атомных энергий.

Захват атомного электрона протоном (перезарядка). Применим адиабатическую теорию возмущений к задаче о перезарядке при пролете медленного протона мимо атома водорода. Предположим, что скорость протона много меньше атомной скорости. Тогда можно применять адиабатическое приближение (Фирсов 1955). Кроме того, предположим, что энергия налетающего протона много больше атомной. Тогда можно считать движение протона заданным.

Гамильтониан системы имеет вид

$$H = T_3 - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R},$$

где R — расстояние между протонами, которое мы будем считать заданной функцией времени; r — координата электрона, T_3 — кинетическая энергия электрона.

Гамильтониан H симметричен относительно перестановки налетающего и покоящегося протонов. Такая перестановка эквивалентна замене $r \rightarrow -r$. Следовательно, можно ввести симметричные и антисимметричные относительно этой перестановки собственные функции гамильтониана H : $\varphi_n^s(r, R)$ и $\varphi_n^a(r, R)$.

Будем считать, что сначала электрон находился около протона, имеющего координату $R/2$. Тогда волновая функция электрона имеет вид $\varphi = \varphi_{n_0}^0(r - \frac{1}{2}R)$, где $\varphi_{n_0}^0$ — кулоновская волновая функция для состояния n_0 .

После рассеяния атом водорода с большей вероятностью останется в состоянии $\varphi_{n_0}^0$. Действительно, для возбуждения нужна компонента Фурье с частотой, равной энергии возбуждения, $\omega_{nn_0} = \varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}$. При медленном пролете, когда время пролета велико по сравнению с обратной частотой $\omega_{nn_0}^{-1}$, компонента Фурье с частотой ω_{nn_0} очень мала и возбуждения не происходит.

Однако электрон может перейти к другому протону. Это явление называется перезарядкой. Критерий адиабатичности (2.30) здесь не выполняется. В самом деле, когда протоны находятся на большом расстоянии друг от друга, волновая функция электрона равна $\varphi_{n_0}^0(r - \frac{1}{2}R)$, если он находится у одного протона, и $\varphi_{n_0}^0(r + \frac{1}{2}R)$, — если у другого. Из этих двух функций можно составить симметричную и антисимметричную комбинации $\varphi_{n_0}^s$ и $\varphi_{n_0}^a$. Оба состояния отвечают одной и той же энергии. Следовательно, мы имеем дело с пересечением уровней.

Поэтому решение уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi \quad (2.31)$$

следует искать в виде суперпозиции этих двух состояний

$\varphi_{n_0}^s$ и $\varphi_{n_0}^a$, после чего нужно применять адиабатическую теорию возмущений. Итак,

$$\begin{aligned} \Psi = C^s(t) \varphi_{n_0}^s(r, R) \exp \left(-i \int_{-\infty}^t \varepsilon^s dt \right) + \\ + C^a(t) \varphi_{n_0}^a(r, R) \exp \left(-i \int_{-\infty}^t \varepsilon^a dt \right). \quad (2.32) \end{aligned}$$

Подставляя (2.32) в (2.31), умножая на $\varphi_{n_0}^s$ и интегрируя по r , получаем

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{dC^s}{dt} + C^s \frac{dR}{dt} \left(\varphi_{n_0}^s \left| \frac{\partial \varphi_{n_0}^s}{\partial R} \right| \right) \right\} \exp \left(-i \int_{-\infty}^t \varepsilon^s dt \right) = \\ = -C^a \frac{dR}{dt} \left(\varphi_{n_0}^s \left| \frac{\partial \varphi_{n_0}^a}{\partial R} \right| \right) \exp \left(-i \int_{-\infty}^t \varepsilon^a dt \right). \quad (2.33) \end{aligned}$$

Если нуклоны находятся далеко друг от друга, то

$$\varphi_n^{s,a}(r, R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_n^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) \pm \varphi_n^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right) \right]. \quad (2.34)$$

Учитывая (2.34), из (2.33) в нулевом приближении получаем

$$C^s = C^s(t = -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C^a = C^a(t = -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

(это соответствует электрону, находящемуся в начальный момент времени возле протона с координатой $R/2$).

При этих значениях C^s, C^a из (2.32) получаем

$$\begin{aligned} \Psi|_{t \rightarrow \infty} = \frac{1}{2} \left[\exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^s dt \right) + \right. \\ \left. + \exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^a dt \right) \right] \varphi_{n_0}^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) + \\ + \frac{1}{2} \left[\exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^s dt \right) - \exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^a dt \right) \right] \varphi_{n_0}^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right). \quad (2.35) \end{aligned}$$

Первое слагаемое здесь соответствует обычному рассеянию, а второе — перезарядке. Квадрат модуля коэффициента при $\varphi_{n_0}^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right)$ дает вероятность перезарядки

$$W(\rho) = \sin^2 \left(\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon^a - \varepsilon^s) dt \right) = \sin^2 \left(\int_a^{\infty} (\varepsilon^a - \varepsilon^s) dt \right), \quad (2.36)$$

где ρ — прицельный параметр.

Мы считаем, что величины $\varepsilon^a(R)$ и $\varepsilon^s(R)$ известны из решения задачи с неподвижными ядрами. Предполагая траекторию налетающей частицы прямолинейной, заменим интегрирование по t интегрированием по R . Так как

$$R^2 = \rho^2 + v^2 t^2,$$

то

$$dt = \frac{1}{v} \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - \rho^2}}.$$

Обозначая $\varepsilon^a(R) - \varepsilon^s(R) \equiv \Phi(R)$, из (2.36) находим

$$W(\rho) = \sin^2 \left(\frac{1}{v} \int_{\rho}^{\infty} \Phi(R) \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - \rho^2}} \right). \quad (2.37)$$

Рассмотрим прицельные расстояния $\rho \sim 1$. Тогда расстояния между частицами, существенные при взаимодействии, также порядка 1. Следовательно, интеграл в (2.37) порядка 1. Поскольку $v \ll 1$, то выражение для $W(\rho)$ сильно меняется при малом изменении ρ . Усредним (2.37) по некоторому интервалу значений ρ , малому по сравнению с ρ :

$$\overline{W} = \frac{1}{2},$$

т. е. перезарядка будет в половине всех случаев.

Рассмотрим теперь вероятность перезарядки при $\rho \gg 1$. Как можно показать*), при больших расстояниях между

*) Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 346.

протонами разность энергий симметричного и антисимметричного состояний равна

$$\varepsilon^a(R) - \varepsilon^s(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\approx} \frac{4}{e} R e^{-R}.$$

Поэтому при $\rho \gg 1$ получаем

$$\begin{aligned} F(\rho) &\equiv \frac{1}{v} \int_{\rho}^{\infty} \Phi(R) \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - \rho^2}} = \\ &= \frac{4}{ev} \int_{\rho}^{\infty} \frac{R^2 e^{-R}}{\sqrt{R^2 - \rho^2}} dR = \frac{4\rho^2 e^{-\rho}}{ev} \int_0^{\infty} \frac{(z+1)^2 dz}{\sqrt{z(z+2)}} e^{-\rho z} \approx \\ &\approx \frac{4\rho^2}{ev} e^{-\rho} \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\infty} z^{-1/2} e^{-\rho z} dz = \frac{\pi \sqrt{2}}{ev} \rho^{3/2} e^{-\rho}. \end{aligned}$$

Мы видим, что $F(\rho) \ll 1$ при $\rho \gg \rho_1 \sim \ln 1/v$. Следовательно,

$$W = \sin^2 F(\rho) \approx F^2(\rho) = \frac{2\pi^2}{e^2 v^2} \rho^3 e^{-2\rho}.$$

Таким образом, при $\rho \ll \rho_1$ величина $F(\rho) \gg 1$, а при $\rho \gg \rho_1$ величина $F(\rho) \ll 1$.

Теперь оценим полное сечение перезарядки

$$\sigma = \int_0^{\infty} \sin^2 F(\rho) \cdot 2\pi\rho d\rho.$$

По порядку величины получаем

$$\sigma = \int_0^{\rho_1} \frac{1}{2} 2\pi\rho d\rho = \frac{1}{2} \pi \rho_1^2 \sim \frac{1}{2} \pi \ln^2 \frac{1}{v}. \quad (2.38)$$

Таким образом, при малых скоростях v сечение перезарядки много больше геометрического сечения.

5. БЫСТРАЯ И МЕДЛЕННАЯ ПОДСИСТЕМЫ

Рассмотрим две подсистемы, одна из которых характеризуется большими, а другая — малыми частотами. Взаимодействие между подсистемами не предполагается малым. Пусть ξ — совокупность координат медленной подсистемы.

Гамильтониан всей системы имеет вид

$$H = H_1(x, \xi) + H_2(\xi),$$

где H_1 включает гамильтониан быстрой подсистемы и ее взаимодействие с медленной подсистемой.

В предыдущем разделе мы считали, что движение медленной подсистемы классично: мы задавали траекторию $\xi = \xi(t)$ и вводили скорость $\dot{\xi}$. Теперь это не будет предполагаться.

Введем систему собственных функций гамильтониана H_1 :

$$H_1(x, \xi) \varphi_n(x, \xi) = \varepsilon_n(\xi) \varphi_n(x, \xi),$$

как это делалось и ранее. Решение всей задачи

$$H\Psi_\lambda = E_\lambda\Psi_\lambda \quad (2.39)$$

ищем в виде

$$\Psi_\lambda = \sum_{n'} u_{n'\lambda}(\xi) \varphi_{n'}(x, \xi). \quad (2.40)$$

Подставляя (2.40) в (2.39),

$$(H_1 + H_2) \sum_{n'} u_{n'\lambda}(\xi) \varphi_{n'}(x, \xi) = E_\lambda \sum_{n'} u_{n'\lambda}(\xi) \varphi_{n'}(x, \xi).$$

Умножая слева на $\varphi_n^*(x, \xi)$ и интегрируя по x , получаем

$$(\varepsilon_n - E_\lambda) u_{n\lambda} + \int \varphi_n^* H_2 \sum_{n'} u_{n'\lambda} \varphi_{n'} dx = 0.$$

При этом для простоты предположено, что H_1 коммутирует с ξ . Далее, так как

$$H_2 u_{n'\lambda} \varphi_{n'} = \varphi_{n'} H_2 u_{n'\lambda} + [H_2, \varphi_{n'}] u_{n'\lambda},$$

то

$$(\varepsilon_n - E_\lambda) u_{n\lambda} + H_2 u_{n\lambda} = - \sum_{n'} \int \varphi_n^* [H_2, \varphi_{n'}] dx \cdot u_{n'\lambda}. \quad (2.41)$$

Это соотношение аналогично соответствующему выражению в предыдущем разделе, только $i\dot{\xi} \frac{\partial \varphi_n}{\partial \xi} = i \frac{d\varphi_n}{dt}$ заменяется коммутатором $[H_2, \varphi_n]$.

В соотношении (2.41) можно перенести член с $n' = n$ налево:

$$\begin{aligned} \left\{ H_2 - \left(E_\lambda - \varepsilon_n - \int \varphi_n^* [H_2, \varphi_n] dx \right) \right\} u_{n\lambda} = \\ = - \sum_{n' \neq n} \int \varphi_n^* [H_2, \varphi_{n'}] dx \cdot u_{n'\lambda}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Это уравнение удобно для применения метода последовательных приближений. В нулевом приближении получаем уравнение

$$\{ H_2(\xi) - [E_\lambda - \varepsilon_n(\xi)] \} u_{n\lambda}^{(0)}(\xi) = 0.$$

Мы видим, что энергия быстрой подсистемы играет роль потенциальной энергии в эффективном гамильтониане медленной подсистемы.

Колебательные уровни энергии молекулы. Оценим энергию колебаний молекулы. Для простоты мы напишем все выражения для иона молекулы водорода, хотя результаты без труда переносятся и на более сложные молекулы. Гамильтониан иона молекулы водорода имеет вид (в атомных единицах)

$$H = -\frac{1}{2} \Delta_r - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R} - \frac{1}{M} \Delta_R.$$

Здесь M — масса протона, r — координата электрона, $\pm \frac{1}{2} R$ — координаты протонов (рис. 21). Ядра образуют медленную подсистему, а электрон — быструю. В обозначениях теории, развитой выше, примем за $H_1(x, \xi)$ гамильтониан

$$H_1(r, R) = -\frac{1}{2} \Delta_r - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R}$$

и за $H_2(\xi)$ гамильтониан

$$H_2(R) = -\frac{1}{M} \Delta_R$$

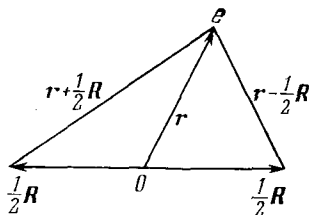


Рис. 21.

(конечно, $1/R$ можно было бы перенести в H_2). Введем функции $\varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$, удовлетворяющие уравнению

$$H_1 \varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \varepsilon_n(\mathbf{R}) \varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}).$$

Они соответствуют собственным функциям электрона при фиксированном расстоянии между ядрами. Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом H имеет вид

$$\Psi_\lambda = \sum_{n\nu} C_\lambda^{n\nu} \chi_{n\nu}(\mathbf{R}) \varphi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (2.43)$$

причем функции $\chi_{n\nu}$ удовлетворяют уравнению

$$\left\{ -\frac{1}{M} \Delta_{\mathbf{R}} + \varepsilon_n(\mathbf{R}) \right\} \chi_{n\nu}(\mathbf{R}) = \omega_{n\nu} \chi_{n\nu}(\mathbf{R}). \quad (2.44)$$

Ядра молекулы колеблются около некоторого среднего положения. Эти колебания имеют малую амплитуду. Поэтому для $\varepsilon_n(\mathbf{R})$ можно написать следующее приближенное выражение:

$$\varepsilon_n(\mathbf{R}) \approx \varepsilon_n(\mathbf{R}_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \right)_{R=R_0} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)^2.$$

Подставляя это $\varepsilon_n(\mathbf{R})$ в уравнение (2.44), получаем уравнение Шредингера для трехмерного осциллятора. Следовательно, колебательные уровни молекулы имеют вид

$$\omega_{n\nu} = \varepsilon_n(\mathbf{R}_0) + \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \omega_0,$$

где ω_0 — частота классического осциллятора.

Найдем зависимость ω_0 от массы молекулы. Из соотношения

$$\frac{1}{2} M \omega_0^2 (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \right)_{R=R_0} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)^2$$

вытекает, что

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{1}{M} \left(\frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \right)_{R=R_0}}.$$

Так как в атомных единицах электронные уровни $\varepsilon_n \sim 1$ и размеры молекулы $R_0 \sim 1$, то $\frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \sim 1$ и, следовательно,

$$\omega_0 \sim \frac{1}{\sqrt{M}}.$$

Поскольку частоты электронных переходов $\omega_{эл} \gtrsim 1$, то мы видим, что $\omega_0 \ll \omega_{эл}$.

Оценим амплитуду колебаний ядер. В основном состоянии осциллятора средние значения кинетической и потенциальной энергии совпадают: $\bar{T} = \bar{U} = E_0/2$ (E_0 — полная энергия), т. е.

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d^2 e_n}{dR^2} \right)_{R=R_0} \cdot \overline{(R - R_0)^2} = \frac{1}{4} \omega_0.$$

Так как $\omega_0 \sim 1/\sqrt{M}$, то средняя квадратичная величина отклонения ядра от положения равновесия имеет оценку

$$\sqrt{\overline{(R - R_0)^2}} \sim \frac{1}{\sqrt[4]{M}} \ll 1.$$

Покажем, что коэффициенты C_{λ}^{nv} в выражении (2.43) для Ψ_{λ} , определяемые уравнением (2.42), можно вычислять методом последовательных приближений. Для этого оценим правую часть (2.42). Раскрывая коммутатор, получим члены следующего вида:

$$\left(\frac{1}{M} \chi_{nv} \varphi_n \left| \frac{d\varphi_{n'}}{dR} \frac{d\chi_{n'v'}}{dR} \right. \right), \quad \left(\frac{1}{M} \chi_{nv} \varphi_n \left| \frac{d^2 \varphi_{n'}}{dR^2} \chi_{n'v'} \right. \right),$$

(члены вида $\left(\frac{1}{M} \chi_{nv} \varphi_n \left| \varphi_{n'} \frac{d^2 \chi_{n'v'}}{dR^2} \right. \right)$ равны нулю). Оценим

производные функции χ_{nv} :

$$\frac{d\chi_{nv}}{dR} \sim \frac{\chi_{nv}}{\sqrt{\overline{(R - R_0)^2}}} \sim \sqrt[4]{M} \chi_{nv}.$$

Поэтому из написанных двух типов членов самым большим будет первый: он порядка $1/\sqrt[4]{M^3}$. Итак, мы обосновали метод итераций в рассматриваемой задаче; параметр разложения $\sim 1/M^{3/4}$, $\omega_0 \sim 1/M^{1/4}$.

Кроме колебательных уровней, молекулы имеют также вращательные уровни. Частоты этих уровней обратно пропорциональны моменту инерции молекулы, т. е.

$$\omega_{вращ} \sim 1/M.$$

Таким образом, электронные, колебательные и вращатель-

ные частоты относятся как:

$$\omega_{\text{вращ}} : \omega_{\text{кол}} : \omega_{\text{эл}} = 1 : \sqrt{M} : M.$$

Возбуждение ядерных дипольных уровней быстрой частицей. Рассмотрим задачу о возбуждении атомного ядра при пролете мимо него быстрой заряженной частицы. В данном случае быстрая подсистема (налетающая частица) имеет сплошной спектр, а медленная (атомное ядро) — дискретный. Найдем решение в предположении, что время пролета частицы мало по сравнению с существенными обратными частотами системы.

Сначала получим общие формулы для применения адиабатического приближения к задаче рассеяния. Введем собственные функции $\varphi_p(r, \xi_i)$ гамильтониана быстрой подсистемы $H_1 = T_r + V(r, \xi_i)$, где T_r — кинетическая энергия частицы, а $V(r, \xi_i)$ — ее взаимодействие с медленной подсистемой; ξ_i — координаты медленной, r — быстрой подсистемы.

Таким образом, функции φ_p удовлетворяют уравнению

$$H_1 \varphi_p(r, \xi_i) = \varepsilon_p \varphi_p(r, \xi_i). \quad (2.45)$$

Энергия частицы $\varepsilon_p = p^2/2M$, т. е. не зависит от ξ_i , в отличие от случая дискретного спектра.

Ищем решение (2.45), имеющее асимптотический вид:

$$\varphi_p \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ipr} + \frac{f(\vartheta, \xi_i)}{r} e^{ipr}. \quad (2.46)$$

Поскольку ε_p не зависит от ξ_i , то уравнение для волновой функции медленной подсистемы (т. е. для ядра) будет таким же, как и без ε_p (только со сдвинутыми на ε_p собственными значениями):

$$H_2 \chi_n(\xi_i) = \omega_n \chi_n(\xi_i).$$

Ищем решение задачи в виде

$$\Psi_{pn} = \sum_n \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} C_{pn}^{p'n'} \varphi_{p'} \chi_{n'},$$

причем коэффициенты $C_{pn}^{p'n'}$ подчиняются уравнению (см. (2.42))

$$(\omega_n - E_{p_0 n_0}) C_{pn}^{p_0 n_0} = - \sum_{n'} \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} (\varphi_p \chi_n [H_2, \varphi_{p'}] \chi_{n'}) C_{pn}^{p'n'}.$$

Это уравнение можно решать последовательными приближениями. Пусть в начальный момент времени ($t = -\infty$) система находилась в состоянии ($p_0, n_0 \equiv 0$). Тогда в нулевом приближении

$$\Psi_{p_0 0}^{(0)} = C_0 \varphi_{p_0} \chi_0.$$

Согласно (2.46) имеем

$$\begin{aligned} \Psi_{p_0 0}^{(0)} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_0 \left(e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{e^{ip_0 r}}{r} f(\vartheta, \xi_i) \chi_0(\xi_i) \right) = \\ = C_0 \left(e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{e^{ip_0 r}}{r} \sum_n (\chi_n / \chi_0) \chi_n \right). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Точное решение должно иметь асимптотический вид:

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{1}{r} \sum_n f_n(\vartheta) e^{ip_n r} \chi_n(\xi_i).$$

Здесь импульс p_n определяется законом сохранения энергии:

$$\varepsilon_{p_n} + \omega_n = \varepsilon_{p_0} + \omega_0.$$

Пренебрегая изменением энергии частицы, получим

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{e^{ip_0 r}}{r} \sum_n f_n(\vartheta) \chi_n(\xi_i). \quad (2.48)$$

Сравним с этим выражением асимптотический вид приближенного решения $\Psi_{p_0 0}^{(0)}$. Из сравнения (2.47) и (2.48) находим C_0 и амплитуды упругого и неупругого рассеяния:

$$\begin{aligned} C_0 &= 1, \\ f_0(\vartheta) &= (\chi_0(\xi_i) | f(\vartheta, \xi_i) | \chi_0(\xi_i)), \\ f_n(\vartheta) &= (\chi_n(\xi_i) | f(\vartheta, \xi_i) | \chi_0(\xi_i)). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Используем полученные результаты для вычисления сечения возбуждения ядерных дипольных уровней быстрой заряженной частицей. Кулоновское взаимодействие пролетающей частицы с нуклонами ядра имеет вид (Z_1 — заряд частицы, Z_2 — заряд ядра):

$$V = Z_1 \sum_i \frac{1}{|r - r_i|} = \frac{Z_1 Z_2}{r} + Z_1 \frac{dr}{r^3} + \dots,$$

где d — дипольный момент ядра. Этот потенциал можно

представить в виде кулоновского, но со сдвинутым началом координат:

$$V \approx \frac{Z_1 Z_2}{\left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right|}.$$

Для этого нужно, чтобы величина $a = |\mathbf{d}/Z_2|$ была мала по сравнению с существенными r , т. е. по сравнению с прицельным параметром ρ : $a \ll \rho$.

Следовательно, волновые функции φ_p будут кулоновскими волновыми функциями со сдвинутым аргументом:

$$\varphi_p(\mathbf{r}, \xi_i) = \varphi_p^Q \left(\mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right) \gamma(\xi_i).$$

Выберем $\gamma(\xi_i)$ так, чтобы φ_p имела асимптотический вид (2.46):

$$\begin{aligned} \varphi_p(\mathbf{r}, \xi_i) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} & \left\{ \exp \left[i p \left(\mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right) \right] + \right. \\ & \left. + \frac{f^Q(\vartheta)}{r} \exp \left[i p \left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right| \right] \right\} \gamma(\xi_i), \end{aligned}$$

где f^Q — амплитуда кулоновского рассеяния. Для совпадения с (2.46) следует взять $\gamma(\xi_i) = e^{i p \mathbf{d} / Z_2}$. Тогда

$$\begin{aligned} \varphi_p(\mathbf{r}, \xi_i) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} & e^{i p \mathbf{r}} + \\ & + \frac{e^{i p \mathbf{r}}}{r} f^Q(\vartheta) \exp \left[i p \left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right| + i p \mathbf{d} \frac{1}{Z_2} - i p \mathbf{r} \right]. \end{aligned}$$

Так как $\left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right| \approx r - \frac{1}{Z_2} \frac{\mathbf{d} \mathbf{r}}{r}$, то

$$\varphi_p(\mathbf{r}, \xi_i) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i p \mathbf{r}} + \frac{e^{i p \mathbf{r}}}{r} f^Q(\vartheta) \exp \left[i q \mathbf{d} \frac{1}{Z_2} \right],$$

где $\mathbf{q} \equiv \mathbf{p} - \frac{p}{r} \mathbf{r}$ — вектор, характеризующий изменение импульса налетающей частицы при столкновении.

Поэтому согласно (2.49)

$$f_n(\vartheta) = f^Q(\vartheta) \left(\chi_n \left| \exp \left(i q \mathbf{d} \frac{1}{Z_2} \right) \right| \chi_0 \right). \quad (2.50)$$

Здесь f^Q — амплитуда кулоновского рассеяния.

Заметим, что сумма сечений для всех возбуждений равна

$$\sum_n |f_n(\vartheta)|^2 = \sum_n \left(\chi_0 \left| \exp \left(-i q d \frac{1}{Z_2} \right) \right| \chi_n \right) \times \\ \times \left(\chi_n \left| \exp \left(i q d \frac{1}{Z_2} \right) \right| \chi_0 \right) |f^Q(\vartheta)|^2 = |f^Q(\vartheta)|^2,$$

т. е. равна сечению кулоновского рассеяния.

Если угол отклонения ϑ мал (малый переданный импульс), то из (2.50) получаем формулу теории возмущений:

$$f_n(\vartheta) \approx f^Q(\vartheta) \left(\chi_n \left| \frac{i}{Z_2} q d \right| \chi_0 \right), \quad (2.51)$$

амплитуда возбуждения пропорциональна дипольному матричному элементу.

Рассеяние протона на атоме водорода (перезарядка). Рассмотрим рассеяние протона на атоме водорода, когда скорость протона много меньше скорости атомного электрона. В противоположность предыдущему случаю здесь дискретна быстрая подсистема, а у медленной подсистемы непрерывный спектр. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = T_r - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R} - \frac{1}{M} \Delta_R.$$

В разделе 2.4 мы рассматривали R как заданную функцию времени. Теперь мы рассматриваем налетающий протон и атом водорода как две взаимодействующие квантовомеханические системы.

Гамильтониан H симметричен к перестановке налетающей и покоящейся частиц ($r \rightarrow -r$). Поэтому можно ввести симметричные и антисимметричные функции $\varphi_n^s(r, R)$ и $\varphi_n^a(r, R)$. Если нуклоны находятся далеко друг от друга, то электрон может находиться около одного либо около другого протона, и, следовательно,

$$\varphi_n^{s,a}(r, R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_n^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) \pm \varphi_n^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right) \right],$$

где в правой части стоят волновые функции атома водорода.

Предположим, что при сближении ядер не происходит пересечения термов. Тогда можно классифицировать их по тем состояниям, из которых они образовались.

Будем считать, что сначала электрон был около протона с координатой $R/2$, т. е. его волновая функция имела вид

$$\Psi = \Phi_{n_0}^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right).$$

Гамильтониан медленной подсистемы равен

$$H_2(R) = -\frac{1}{M} \Delta_R,$$

а его собственные функции находятся из уравнения

$$\left[-\frac{1}{M} \Delta_R + \varepsilon_n^{s,a}(R) \right] \chi_{pn}^{s,a}(R) = E_p \chi_{pn}^{s,a}(R)$$

и имеют асимптотический вид

$$\chi_{pn}^{s,a}(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} e^{ipR} + \frac{f_n^{s,a}}{R} e^{ipR}.$$

В нулевом приближении решение задачи имеет вид (см. стр. 101)

$$\Psi_\lambda = C_{np}^{\lambda s} \Phi_n^s(r, R) \chi_{pn}^s(R) + C_{np}^{\lambda a} \Phi_n^a(r, R) \chi_{pn}^a(R). \quad (2.52)$$

Коэффициенты $C_{np}^{\lambda s}$ и $C_{np}^{\lambda a}$ определяются из асимптотического вида Ψ_λ :

$$\begin{aligned} \Psi_\lambda \xrightarrow{R \rightarrow \infty} & \Phi_{n_0}^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) e^{ip_0 R} + \\ & + \left[f_1 \Phi_{n_0}^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) + f_2 \Phi_{n_0}^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right) \right] \frac{e^{ip_0 R}}{R}, \end{aligned} \quad (2.53)$$

где f_1 — амплитуда упругого рассеяния, а f_2 — амплитуда перезарядки.

Чтобы обеспечить асимптотический вид (2.53), нужно считать в (2.52) $p = p_0$ и $n = n_0$. Тогда волновая функция (2.52) становится равной

$$\Psi_\lambda = C^s \Phi_{n_0}^s(r, R) \chi_{p_0 n_0}^s(R) + C^a \Phi_{n_0}^a(r, R) \chi_{p_0 n_0}^a(R)$$

и имеет асимптотический вид

$$\Psi_{\lambda} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} e^{i p_0 R} (C^s \varphi_{n_0}^s + C^a \varphi_{n_0}^a) + \frac{1}{R} e^{i p_0 R} (f_s C^s \varphi_{n_0}^s + f_a C^a \varphi_{n_0}^a). \quad (2.54)$$

Выражения (2.53) и (2.54) должны совпадать, т. е. нужно потребовать

$$C^s = C^a = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Тогда из (2.54) находим

$$\begin{aligned} \frac{f_s \varphi_{n_0}^s + f_a \varphi_{n_0}^a}{\sqrt{2}} &= \frac{1}{2} \left\{ f_s \left[\varphi_{n_0}^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) + \varphi_{n_0}^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + f_a \left[\varphi_{n_0}^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) - \varphi_{n_0}^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right) \right] \right\} = \\ &= f_1 \varphi_{n_0}^0 \left(r - \frac{1}{2} R \right) + f_2 \varphi_{n_0}^0 \left(r + \frac{1}{2} R \right), \end{aligned}$$

т. е.

$$f_1 = \frac{f_s + f_a}{2}, \quad f_2 = \frac{f_s - f_a}{2}. \quad (2.55)$$

Таким образом, для нахождения амплитуды перезарядки f_2 и амплитуды упругого рассеяния f_1 необходимо вычислить амплитуды f_s и f_a . Чтобы найти их, нужно решить уравнение

$$\left[-\frac{1}{M} \Delta_R + \varepsilon_n^{s,a}(R) \right] \chi_{pn}^{s,a} = E_p \chi_{pn}^{s,a}$$

с величинами $\varepsilon_n^{s,a}(R)$, которые определяются из решения задачи об электроны в поле двух центров. В дальнейшем (стр. 168) мы найдем решение этой задачи в квазиклассическом приближении.

6. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В СЛУЧАЕ БЛИЗКИХ УРОВНЕЙ

Рассмотрим систему с двумя близкими уровнями, на которую наложено возмущение (случай бóльшего числа близких уровней внесет лишь алгебраические усложнения). Пусть возмущение достаточно малó, так что можно пренебречь примесью состояний с далекими энергиями,

между тем как состояния с близкими энергиями смешиваются сильно.

Решение уравнения Шредингера

$$(H_0 + H') \Psi = E \Psi,$$

где H' — возмущение, следует искать в виде суперпозиции состояний, соответствующих близким уровням:

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2, \quad (2.56)$$

причем функции $\Psi_{1,2}$ удовлетворяют невозмущенному уравнению

$$H_0 \Psi_{1,2} = \varepsilon_{1,2} \Psi_{1,2}.$$

Коэффициенты C_1, C_2 в (2.56) имеют одинаковый порядок величины.

Найдем энергетические уровни возмущенной системы. Для этого запишем уравнение Шредингера в представлении C_1, C_2 :

$$\begin{cases} (E - \varepsilon_1) C_1 = H'_{11} C_1 + H'_{12} C_2, \\ (E - \varepsilon_2) C_2 = H'_{21} C_1 + H'_{22} C_2. \end{cases} \quad (2.57)$$

Коэффициенты C_1, C_2 отличны от нуля, если детерминант системы (2.57) равен нулю, т. е.

$$\begin{vmatrix} E - \varepsilon_1 - H'_{11} & -H'_{12} \\ -H'_{21} & E - \varepsilon_2 - H'_{22} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.58)$$

Отсюда получаем

$$E = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + H'_{11} + H'_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + H'_{11} + H'_{22})^2}{4} - (\varepsilon_1 + H'_{11})(\varepsilon_2 + H'_{22}) + |H'_{12}|^2}.$$

Обозначая $\varepsilon_1 + H'_{11} = \tilde{\varepsilon}_1$, $\varepsilon_2 + H'_{22} = \tilde{\varepsilon}_2$, окончательно находим

$$E = \frac{\tilde{\varepsilon}_1 + \tilde{\varepsilon}_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2)^2 + 4|H'_{12}|^2}. \quad (2.59)$$

В случае применимости обычной теории возмущений: $|H'_{12}| \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$, из (2.59) получаем

$$E^{(1)} \approx \varepsilon_1 + H'_{11} + \frac{|H'_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2},$$

$$E^{(2)} \approx \varepsilon_2 + H'_{22} - \frac{|H'_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2},$$

что и следовало ожидать. При $H' \rightarrow 0$ величина $E^{(1)} \rightarrow \varepsilon_1$, а $E^{(2)} \rightarrow \varepsilon_2$. Наоборот, в случае $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$ из (2.59) имеем

$$E = \varepsilon + \frac{H'_{11} + H'_{22}}{2} \pm |H'_{12}|. \quad (2.60)$$

Заметим, что если для какого-либо возмущения, зависящего от параметра, $H'_{12} \neq 0$, то уровни $E^{(1)}$ и $E^{(2)}$, как функции параметра ξ , не пересекаются, так как в (2.59) $\sqrt{(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2)^2 + 4|H'_{12}|^2} > 0$. Уровни энергии при этом имеют вид, изображенный на рис. 22.

Частица в периодическом потенциале. Рассмотрим, как изменяется движение свободной частицы при наложении периодического возмущения

$$V = V_0 (e^{ikx} + e^{-ikx}).$$

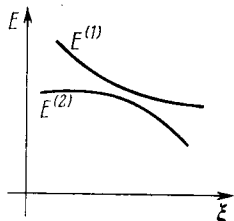


Рис. 22.

Волновая функция невозмущенной задачи имеет вид $\Psi_p = e^{ipx}$. Среднее значение V по любому невозмущенному состоянию равно нулю, а отличны от нуля лишь матричные элементы $V_{p,p-k} = V_{p,p+k} = V_0$ (длину ямы считаем равной 1). В обычной теории возмущений сдвиг энергетических уровней равен

$$E_p = \varepsilon_p + \frac{V_0^2}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}} + \frac{V_0^2}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+k}},$$

где $\varepsilon_p = p^2/2M$. Однако это выражение применимо лишь в случае $V_0 \ll |\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}|$, т. е. когда p не близко к $\pm k/2$.

Если $p \rightarrow k/2$, то состояния Ψ_p и Ψ_{p-k} имеют близкие энергии, и волновую функцию частицы нужно искать в виде

$$\Psi = C_1 \Psi_p + C_2 \Psi_{p-k}$$

(при $p \rightarrow -k/2$ $\Psi = C_1 \Psi_p + C_2 \Psi_{p+k}$). Из (2.59) для собственных значений энергии получаем выражение:

$$E_p = \frac{\varepsilon_p + \varepsilon_{p-k}}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k})^2}{4} + V_0^2}. \quad (2.61)$$

Выбор знака в (2.61) определяется тем условием, чтобы при $|\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}| \gg V_0$ энергия E_p стремилась к ε_p . Так

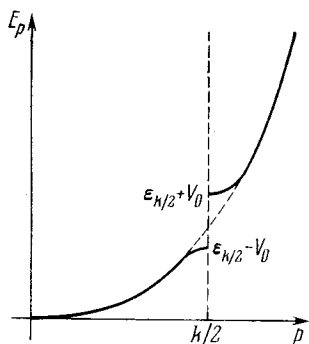


Рис. 23.

как при $p < k/2$ величина $\sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k})^2} = |\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}| = \varepsilon_{p-k} - \varepsilon_p$, а при $p > k/2$ $\sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k})^2} = \varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}$, то для $p < k/2$ в (2.61) нужно взять один знак корня, а при $p > k/2$ — другой. Для E_p получается разрывная кривая, изображенная на рис. 23. При этом величина разрыва равна $E_{k/2+0} - E_{k/2-0} = 2V_0$.

Таким образом, при наложении периодического потенциала в спектре свободных частиц появляется щель.

Отсюда понятно возникновение запрещенных зон в металлах для электронов (правда, там нужно рассматривать трехмерный случай).

Из (2.61) следует, что $\left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=k/2} = 0$, т. е. групповая скорость частицы на краю зоны ($p = k/2$) равна нулю. Это соответствует тому, что на краю зоны волновая функция частицы есть стоячая, а не бегущая волна.

Штарк-эффект в случае близких уровней. Рассмотрим систему с двумя близкими уровнями, на которую наложено однородное электрическое поле $V(x) = -\mathcal{E}x$. Определим, как изменяется энергия системы в этом поле.

Среднее значение V по любому состоянию с определенной четностью равно нулю (дипольный момент

$$d_x = \int \Psi_\lambda^*(r) x \Psi_\lambda(r) dr$$

при замене переменной интегрирования $r \rightarrow -r$ переходит в $-d_x$, т. е. $d_x = 0$). Для энергетических уровней $E_{1,2}$ системы в поле получаем:

$$E_{1,2} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2}{4} + |V_{12}|^2}. \quad (2.62)$$

Рассмотрим, например, состояния $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ атома водорода. Они обладают одинаковой энергией (если не учитывать лэмбовского смещения). Расщепление такого дублетного уровня при наложении электрического поля линейно по полю и равно $E_2 - E_1 = 2 |V_{12}|$.

Вычислим V_{12} . Для уровня $2s_{1/2}$ волновая функция равна $R_{20}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, а для уровня $2p_{1/2}$ равна $R_{21} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$. $R_{nl}(r)$ — радиальные кулоновские функции. Следовательно,

$$V_{12} = -\mathcal{E} (R_{20} | r | R_{21}) \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int \cos^2 \theta d\Omega = -\frac{\mathcal{E}}{\sqrt{3}} (R_{20} | r | R_{21}).$$

Матричные элементы дипольного момента для кулоновских радиальных функций табулированы. В частности, $(R_{20} | r | R_{21}) = 3\sqrt{3}$. Следовательно, $|V_{12}| = 3\mathcal{E}$.

Итак, расщепление дублета $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ в слабом электрическом поле в атомных единицах равно $6\mathcal{E}$.

Заметим, что уровень $2p_{3/2}$ имеет ту же четность, что и $2p_{1/2}$. Поэтому $\int \Psi_{2p_{3/2}}^* x \Psi_{2p_{1/2}} dr = 0$. Следовательно, эти уровни в нашем линейном по полю приближении не расщепляются. Для их расщепления нужно рассматривать суперпозицию трех состояний — $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$.

Для всех других атомов, кроме атома водорода, расщепление термов квадратично по полю:

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2.$$

Действительно, уровни сложных атомов не вырождены относительно орбитального квантового числа l , т. е. нет

состояний с близкими энергиями, которые перемешивались бы в слабом электрическом поле.

Изменение времени жизни состояния $2s_{1/2}$ атома водорода во внешнем электрическом поле. В атоме водорода состояние $2s_{1/2}$ имеет большое время жизни. Действительно, переход $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ может происходить лишь с испусканием двух γ -квантов. Время жизни состояния $2s_{1/2}$, по отношению к этому переходу порядка $1/7$ сек. Кроме того, возможен еще дипольный переход $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ (энергии обоих состояний различаются из-за лэмбовского смещения). Оценим вероятность этого перехода.

В (1.3) мы нашли, что вероятность дипольного перехода $w \sim \omega^3/c^3$, где ω — частота перехода. Разность энергий $\omega = E_{2s_{1/2}} - E_{2p_{1/2}}$ имеет порядок $1/c^3$ (см. стр. 71). Следовательно, $w \sim 1/c^{12}$. В атомных единицах $c \approx 137$, следовательно, $w \sim 10^{-24}$, т. е. время жизни состояния $2s_{1/2}$ по отношению к переходу $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ порядка $10^{24}\tau_{\text{ат}}$, где $\tau_{\text{ат}}$ — атомное время $\sim 10^{-17}$ сек. Итак, рассматриваемое время $\sim 10^7$ сек. Мы видим, что переход $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ все же вероятнее, чем переход $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$.

При наложении внешнего поля состояние атома будет суперпозицией состояний $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$. Но как только атом перейдет в состояние $2p_{1/2}$, он моментально (за время $\tau \sim 10^{-10}$ сек) совершит дипольный переход: $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$. Мы видим, что время жизни состояния $2s_{1/2}$ резко изменяется при наложении электрического поля. Итак, будем считать $\Psi = C_1 e^{-i\varepsilon_1 t} \psi_1 + C_2 e^{-i\varepsilon_2 t} \psi_2$, где индекс 1 соответствует состоянию $2s_{1/2}$, а индекс 2 — состоянию $2p_{1/2}$. Для величин C_1, C_2 имеем уравнения

$$\left. \begin{aligned} i\dot{C}_1 &= V_{12}C_2 \exp[i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)t], \\ i\dot{C}_2 &= -i\frac{1}{\tau}C_2 + V_{21}C_1 \exp[-i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)t]. \end{aligned} \right\} \quad (2.63)$$

Здесь $V = -\mathcal{E}x$. Матричные элементы $V_{11} = V_{22} = 0$. Затухания состояния $2s_{1/2}$ со временем $\sim 1/7$ сек не учитываем.

Даже в отсутствие внешнего поля C_2 не является постоянной: $C_2^{(0)} \sim \exp(-t/\tau)$ из-за взаимодействия с полем излучения. Здесь τ имеет порядок времени жизни дипольного состояния ($\tau \sim 10^{-10}$ сек). $C_1^{(0)}$ считаем постоян-

ной, поскольку время затухания состояния $2s_{1/2}$ очень велико.

Обозначим $C \equiv C_2 \exp(i\varepsilon_{12}t)$, где $\varepsilon_{12} \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ — лэмбовское смещение ($\varepsilon_{12} \sim 1/\tau$).

Тогда из (2.63) имеем

$$i\dot{C}_1 = V_{12}C, \quad i\dot{C} = V_{21}C_1 - (\varepsilon_{12} + i/\tau)C. \quad (2.64)$$

Исключая C_1 , получаем

$$\ddot{C} + \left(-i\varepsilon_{12} + \frac{1}{\tau}\right)\dot{C} + |V_{12}|^2 C = 0.$$

Ищем решение уравнения в виде $C = Ae^{i\omega t}$. Получаем

$$\omega^2 - \omega\left(\frac{i}{\tau} + \varepsilon_{12}\right) - |V_{12}|^2 = 0, \quad (2.65)$$

что дает два комплексных корня для ω .

В начальный момент времени $C_1 = 1$, $C = 0$. Начальное условие для C будет выполнено, если искать C в виде $C = a [\exp(i\omega^{(1)}t) - \exp(i\omega^{(2)}t)]$. Из (2.64) находим

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{i\dot{C} + (\varepsilon_{12} + i/\tau)C}{V_{21}} = \\ &= \frac{a}{V_{21}} \left\{ \left(\frac{i}{\tau} + \varepsilon_{12} - \omega^{(1)} \right) \exp(i\omega^{(1)}t) + \right. \\ &\quad \left. + \left(-\frac{i}{\tau} - \varepsilon_{12} + \omega^{(2)} \right) \exp(i\omega^{(2)}t) \right\}. \end{aligned}$$

Величина a определяется из условия $C_1(t=0) = 1$:

$$a = V_{21} (\omega^{(2)} - \omega^{(1)})^{-1}.$$

Из уравнения (2.65) найдем частоты $\omega^{(1)}$, $\omega^{(2)}$:

$$\omega = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left(\varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right)^2 + |V_{12}|^2}. \quad (2.66)$$

Рассмотрим случай $|V_{12}| \ll 1/\tau$. Тогда из (2.66)

$$\omega^{(1)} \approx \varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau}, \quad \omega^{(2)} \approx \frac{V_{12}^2}{\varepsilon_{12}^2 + \frac{1}{\tau^2}} \left(\frac{i}{\tau} - \varepsilon_{12} \right).$$

Следовательно, состояние $2s_{1/2}$ имеет в этом случае очень большое время жизни $\sim 1/|V_{12}|^2 \tau$.

Рассмотрим теперь противоположный предельный случай, когда наложенное поле столь велико, что $|V_{12}| \geq 1/\tau$. Тогда

$$\omega^{(1,2)} \approx \frac{1}{2} \left(\epsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right) \pm |V_{12}| \pm \frac{1}{8|V_{12}|} \left(\epsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right)^2$$

и время затухания C_1 становится равным по порядку величины времени жизни дипольного состояния τ .

Итак, время жизни состояния $2s_{1/2}$ атома водорода чрезвычайно сильно (на девять порядков) уменьшается при наложении электрического поля порядка $\mathcal{E} \sim \frac{1}{\tau} \sim$
 $\sim c^{-3} \sim \frac{10^9}{137^3} \text{ в} \sim 500 \text{ в}.$

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В этой главе рассматривается приближенный метод решения уравнения Шредингера для того случая, когда длина волны частицы мала по сравнению с расстоянием, на котором существенно изменяется потенциал. Простейшие примеры такого приближения были рассмотрены в 1.1.

Поскольку переход к малой длине волны соответствует переходу к классической механике, квазиклассическое приближение позволяет проследить связь классической и квантовой механики. Особенно отчетливо эта связь видна в принадлежащей Фейнману пространственно-временной формулировке квантовой механики *). Согласно этому подходу волновая функция в точке (x, t) определяется из волновой функции $\Psi(x_0, t_0)$ умножением на $\exp(i \sum_k S_k)$ ($S_1, S_2, \dots, S_k, \dots$ — функции действия для всех траекторий, соединяющих точки (x_0, t_0) и (x, t)), и интегрированием по x_0 . Поскольку возможные траектории образуют непрерывное множество, в показателе экспоненты стоит интеграл по всем возможным траекториям (континуальный интеграл).

Пусть имеется классическая траектория, соединяющая точки (x_0, t_0) и (x, t) . Так как функция действия минимальна вдоль классической траектории, то вклад пучка траекторий, прилегающих к классической, дает наименьший фазовый множитель. Между тем траектории, идущие вдали от классической, сильно осциллируют и погашают друг друга. В результате в континуальном интеграле эффективно остается трубка траекторий, прилегающих к классической, и поэтому

$$\Psi(x, t) = \int A(x, x_0) e^{iS_0(x, t; x_0, t_0)} \Psi(x_0, t_0) dx_0,$$

*) Ф. Фейнман, А. Хибс, «Квантовая механика и интегралы по траекториям», «Мир», 1968 г.

где S_0 — действие, вычисленное по классической траектории. Множитель A определяется эффективной шириной трубки участвующих траекторий.

Для стационарной задачи $S_0(x, t; x_0, t_0) = S_0(x, x_0) - E(t - t_0)$ и, следовательно, так как $S_0(x, x_0) = S_0(x, x_1) + S_0(x_1, x_0)$, где x_1 — произвольная точка на траектории,

$$\Psi(x) \sim a(x, x_1) e^{iS_0(x, x_1)}.$$

Именно такой результат получается и в обычной формулировке квантовой механики.

Этот результат обобщается на случай траекторий, для которых действие S комплексно — роль «классической» играет траектория, вносящая вместе с прилегающими траекториями наибольший вклад в континуальный интеграл.

Функция действия на такой траектории, как и в случае вещественного S , подчиняется уравнению Гамильтона — Якоби. В частности, при движении под потенциальным барьером S принимает мнимые значения. После такого обобщения квазиклассическое приближение дает разумные результаты даже в тех случаях, когда условие применимости этого приближения казалось бы не выполнено. С примером такого рода мы столкнулись при получении асимптотического выражения для Γ -функции. Выражение, полученное в пределе $x \gg 1$, оказалось с хорошей точностью справедливым при $x = 1$. Аналогично этому стационарное решение уравнения Шредингера для основного и первого возбужденного состояний достаточно хорошо описывается квазиклассическим приближением, хотя для формального выполнения этого приближения требуется, чтобы число узлов n волновой функции было бы много больше 1. Причина этого ниже выясняется — параметром разложения является не $1/n$, а величина $\xi = 1/\pi^2 n^2$, которая достаточно мала уже при $n = 1$.

В некоторых задачах (надбарьерное отражение, возбуждение системы пролетающей частицей) возникают интегралы от сильно осциллирующих функций. Эти интегралы вычисляются методом перевала и обычно определяются окрестностью ближайших к вещественной оси особых точек потенциала.

Ниже выясняется, в каких случаях эти интегралы не будут экспоненциально малы. Вычисления используются, как повод для более подробного изучения ме-

тогда перевала. Изучается задача о вылете частицы из потенциального барьера. Вопрос сводится к задаче о распылении пакета, описывающего частицу, находящуюся в начальный момент времени внутри барьера. Показано, что вероятность найти исходную систему нераспавшейся через время t экспоненциально падает со временем.

Возникающие при расчете дополнительные слагаемые, неэкспоненциально зависящие от времени, определяются распылением пакета медленных частиц, образовавшихся в процессе приготовления исходной системы, и не имеют отношения к процессу распада.

Для лучшего понимания квазиклассического приближения в 3-мерном случае читателю следует обратить внимание на вычисление распределения заряда в атоме и на квазиклассическую задачу рассеяния.

1. ОДНОМЕРНАЯ ЗАДАЧА

Напишем уравнение Шредингера в виде

$$\varphi'' + k^2(x) \varphi = 0, \quad (3.1)$$

где

$$k^2(x) = 2[E - V(x)].$$

Пусть потенциал $V(x)$ достаточно медленно меняется с изменением координаты, так что

$$kl \gg 1, \quad (3.2)$$

где l — длина, на которой существенно меняется $V(x)$.

Тогда приближенное решение задачи имеет вид (см. стр. 28)

$$\varphi(x) = \frac{a}{\sqrt{k(x)}} \exp \left[\pm i \int_{x_1}^x k dx \right]. \quad (3.3)$$

Это относится к случаю $E > V$, когда k вещественно. В случае $E < V$ решение будет содержать растущую и затухающую экспоненты, т. е.

$$\varphi(x) = A \exp \left[\pm \int_{x_1}^x |k| dx \right], \quad (3.4)$$

где $A = a/\sqrt{|k|}$. Мы получили первое приближение в

разложении по степеням величины $1/(kl)^2$. Можно получить и следующие приближения. Оказывается, что получающийся при этом ряд по степеням параметра $1/(kl)^2$ асимптотический, а не обычный.

ЗАДАЧА

Показать, что при приближенной оценке производной от квазиклассической функции нужно дифференцировать лишь экспоненту.

Асимптотические ряды. Напомним, что такое асимптотический ряд. Пусть

$$s_n = \sum_{v=0}^n \frac{a_v}{z^v}$$

— частичная сумма ряда. Пусть при фиксированном z и $n \rightarrow \infty$ величина $s_n \rightarrow \infty$, но при фиксированном n и $z \rightarrow \infty$ сумма s_n все лучше и лучше аппроксимирует некоторую функцию $f(z)$, т. е.

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z^n [s_n(z) - f(z)] = 0. \quad (3.5)$$

Здесь $z \rightarrow \infty$ в заданном интервале $\arg z$.

Тогда говорят, что s_n есть асимптотическое представление $f(z)$. Это не есть ряд в обычном смысле этого слова, так как s_n расходится. Но из него можно извлечь сведения о функции $f(z)$, так как при $z \rightarrow \infty$ он хорошо представляет эту функцию.

Иными словами, сходящийся ряд стремится к $f(z)$, когда $n \rightarrow \infty$ для данного z , в то время как асимптотический ряд стремится к $f(z)$, когда $z \rightarrow \infty$ для данного n .

Построим $s_n(z)$ по заданной $f(z)$. Величина s_0 равна a_0 , следовательно, $a_0 = f(\infty)$. Величина $s_1 = a_0 + a_1/z$, тогда

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z \left(a_0 + \frac{a_1}{z} - f(z) \right) = 0,$$

т. е.

$$a_1 = \lim_{z \rightarrow \infty} z [f(z) - a_0] = \lim_{z \rightarrow \infty} z [f(z) - f(\infty)].$$

Аналогичным образом находятся все коэффициенты a_n .

Однако восстановить обратно функцию по ее асимптотическому представлению нельзя. Например, пусть $f(z) = e^{-z}$, тогда

$$a_0 = 0, \quad a_1 = \lim_{z \rightarrow \infty} ze^{-z} = 0, \quad a_2 = a_3 = \dots = a_n = 0.$$

Следовательно, весь асимптотический ряд равен нулю для функции e^{-z} . Итак, функции $f(z)$ и $f(z) + e^{-z}$ имеют одинаковые асимптотические представления.

Обозначим $z = kl$. Оказывается, что квазиклассическое решение

$$\varphi_{\text{кв.кл}}(x) \approx \sum_{v=0}^n \frac{a_v(x)}{z^v} \quad (3.6)$$

есть асимптотический ряд, т. е. ряд, расходящийся при $n \rightarrow \infty$. Однако при $z \rightarrow \infty$ величина $a_0(x)$ сколь угодно хорошо представляет функцию $\varphi(x)$ (точное решение).

Пусть, далее, z фиксировано. При $n \rightarrow \infty$ квазиклассический ряд расходится. Следовательно, при любом z есть оптимальное число членов $n(z)$, которое наилучшим образом описывает функцию $\varphi(x)$. Можно показать, что оптимальное число членов квазиклассического приближения $n \sim kl$. Мы будем пользоваться только нулевым членом этого ряда.

Сшивание квазиклассических функций. В этом разделе мы найдем, как нужно сшивать квазиклассическую волновую функцию φ в области, доступной для классического движения, с φ в запрещенной области. Для определенности предположим, что потенциальная энергия частицы имеет вид, изображенный на рис. 24 (начало координат взято в точке, где $V(x) = E$).

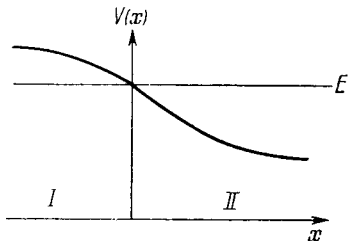


Рис. 24.

Квазиклассическое решение в области II (классически доступной) согласно (3.3) имеет вид

$$\varphi = \frac{a_1}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_0^x k dx\right) + \frac{a_2}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_0^x k dx\right), \quad (3.7)$$

а в области I (классически недоступной)

$$\varphi = \frac{b_1}{\sqrt{|k|}} \exp \left(\int_x^0 |k| dx \right) + \frac{b_2}{\sqrt{|k|}} \exp \left(- \int_x^0 |k| dx \right). \quad (3.8)$$

Если бы квазиклассическое решение было аналитической функцией x в окрестности $x = 0$, то для нахождения соотношений между a_1 , a_2 и b_1 , b_2 нужно было бы аналитически продолжить это решение из II в I (при этом экспоненты в (3.7) просто перешли бы в экспоненты (3.8)).

Правда, по вещественной оси нельзя было бы двигаться, так как в окрестности $x = 0$ квазиклассика неприменима ($k(0) = 0$, поэтому условие $kl \gg 1$ не выполняется). Эту трудность можно было бы преодолеть, обойдя точку $x = 0$ в комплексной плоскости по дуге достаточно большого радиуса (где применима квазиклассика).

Однако такое аналитическое продолжение дает, как мы увидим, неправильный результат.

Оказывается, что при таком обходе обязательно пересекаются линии (они называются линиями Стокса), где портится аналитическое продолжение. Это явление характерно для асимптотических разложений. Мы покажем, как следует находить аналитическое продолжение в подобных случаях.

Другой возможный путь состоит в том, чтобы искать точное решение задачи вблизи $x = 0$, считая потенциал прямолинейным. Это решение описывается так называемой функцией Эйри. Затем нужно сшить точное решение с квазиклассическим при $x > 0$ и $x < 0$.

Разумеется, так можно поступать только зная, что квазиклассическое приближение становится применимым на расстояниях от точки поворота, малых по сравнению с расстоянием, на котором потенциал существенно отклоняется от прямолинейного. Покажем, что при большом параметре квазиклассичности ($kl \gg 1$) это действительно так.

Разложим для этого потенциал $V(x)$ вблизи $x = 0$ в ряд: $V(x) \approx E + V'(0)x$. Тогда импульс $k(x) = \sqrt{-2V'(0)x} \equiv \alpha \sqrt{x}$. Оценим величину α :

$$\alpha \sim \sqrt{|V'(0)|} \sim \sqrt{\frac{\bar{V}(0)}{l}} \sim \frac{k_0}{l},$$

где $k_0 = \sqrt{2E}$, а l — длина, на которой существенно меняется потенциал $V(x)$. Итак, в окрестности точки $x = 0$ величина $k(x) \sim k_0 \sqrt{\frac{x}{l}}$. Чтобы квазиклассическое приближение было применимо, нужно отойти от точки $x = 0$ на такое расстояние, чтобы

$$d\left(\frac{1}{k}\right)/dx \ll 1 \text{ или } \frac{\sqrt{l}}{k_0 \sqrt{x^3}} \ll 1.$$

Отсюда находим: $x \gg l/(k_0 l)^{2/3}$. Так как $k_0 l \gg 1$, то можно выбрать такое x_1 , что

$$\frac{l}{(k_0 l)^{2/3}} \ll x_1 \ll l.$$

На расстояниях $\sim x_1$, с одной стороны, уже годится квазиклассическое приближение, а с другой, — потенциал все еще можно считать прямолинейным.

Сшивку с помощью функций Эйри для потенциала, изображенного на рис. 24, имеет вид *)

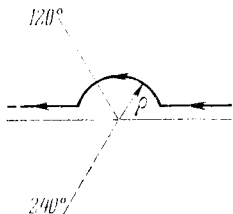


Рис. 25.

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left[i \int_0^x k dx - \frac{\pi}{4} \right] \rightarrow \frac{1}{i \sqrt{|k|}} \exp \left[\int_x^0 |k| dx \right] +$$

$$+ \frac{1}{2 \sqrt{|k|}} \exp \left[- \int_x^0 |k| dx \right], \quad (3.9)$$

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left[-i \int_0^x k dx + \frac{\pi}{4} \right] \rightarrow \frac{-1}{i \sqrt{|k|}} \exp \left[\int_x^0 |k| dx \right] +$$

$$+ \frac{1}{2 \sqrt{|k|}} \exp \left[- \int_x^0 |k| dx \right].$$

Сейчас мы получим эти соотношения, не прибегая к функциям Эйри. Выберем радиус обхода ρ порядка x_1 (рис. 25). Тогда можно пользоваться квазиклассическим приближением и в то же время считать потенциал прямолинейным. Так как при этом

$$k(x) = \alpha x^{1/2}, \text{ то } \int_0^x k dx = \frac{2}{3} \alpha x^{3/2}.$$

*) Л. Ш и ф ф, Квантовая механика, ИЛ, 1959.

В комплексной плоскости

$$x = \rho e^{i\varphi} \text{ и } \int_0^{\infty} k dx = \frac{2}{3} \alpha \rho^{3/2} \exp\left(\frac{3}{2} i\varphi\right).$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left[i \int_0^{\infty} k dx\right] = \\ = \frac{1}{\sqrt{\alpha \rho^{1/2}}} e^{-i \frac{\varphi}{4}} \exp\left[\frac{2}{3} \alpha \rho^{3/2} \left(i \cos \frac{3}{2} \varphi - \sin \frac{3}{2} \varphi\right)\right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

По мере обхода контура до тех пор, пока $\varphi < 2\pi/3$, $\sin \frac{3}{2} \varphi$ положителен, а выражение (3.10) содержит затухающую экспоненту. Если $\varphi > 2\pi/3$, то (3.10) содержит растущую экспоненту. Как только появляется растущая экспонента, все слагаемые, содержащие убывающую экспоненту, не должны учитываться, поскольку квазиклассическое приближение, будучи асимптотическим представлением, имеет по параметру квазиклассичности степенную ($\sim 1/k^2 l^2$), а не экспоненциальную точность. Поэтому аналитическое продолжение позволяет найти коэффициент только при растущей экспоненте.

Получаем

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp i \left[\int_0^{\infty} k dx - \frac{\pi}{4} \right] \rightarrow \frac{1}{i \sqrt{|k|}} \exp \left[\int_x^0 |k| dx \right]. \quad (3.11)$$

При этом мы потеряли слагаемое, экспоненциально малое по сравнению с правой частью (3.11).

При обходе точки $x = 0$ снизу функция (3.11) переходит сначала в растущую экспоненту, а затем после пересечения линии

$$\varphi = -\frac{2\pi}{3}$$

— в убывающую. Потерянная из-за неточности квазиклассического приближения в области $-2\pi/3 < \varphi < 0$ экспоненциально малая добавка после перехода в область $-\pi < \varphi < -2\pi/3$ превращается в экспоненциально большой член, который таким образом теряется. Следовательно, таким путем мы не можем получить правильное значение коэффициента при убывающей экспоненте.

Как его получить? Предположим, что в классически недоступной области (при $V > E$) есть только затухающая экспонента:

$$\frac{1}{V|k|} \exp \left[- \int_x^0 |k| dx \right]. \quad (3.12)$$

Общее решение при $V < E$ имеет вид

$$\frac{C_1}{V\bar{k}} \exp \left[i \int_0^x k dx - i\varphi_1 \right] + \frac{C_2}{V\bar{k}} \exp \left[- i \int_0^x k dx + i\varphi_2 \right]. \quad (3.13)$$

Найдем C_1 , C_2 и φ_1 , φ_2 . Для этого продолжим аналитически (3.12) в область $x > 0$. Аналитическое продолжение через верхнюю полуплоскость имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{V|k|} \exp \left[- \int_x^0 |k| dx \right] \rightarrow \\ \rightarrow \frac{\exp [i\pi/4]}{V\alpha\rho^{1/2} \exp (i\varphi/2)} \exp \left[\frac{2}{3} \alpha\rho^{3/2} \left(\sin \frac{3}{2} \varphi - i \cos \frac{3}{2} \varphi \right) \right]. \end{aligned}$$

При $\varphi = 0$ получаем второе слагаемое (3.13), причем $\varphi_2 = \pi/4$, $C_2 = 1$. Аналитически продолжая через нижнюю полуплоскость, мы получили бы первое слагаемое (3.13) со значениями

$$\begin{aligned} \varphi_1 = \varphi_2 = \pi/4, \\ C_1 = C_2 = 1. \end{aligned}$$

Каждый раз одно из слагаемых теряется из-за экспоненциально малой ошибки в той области, где функция экспоненциально велика. Таким образом, имеем

$$\frac{1}{V|k|} \exp \left[- \int_x^0 |k| dx \right] \rightarrow \frac{2}{V\bar{k}} \cos \left(\int_0^x k dx - \frac{\pi}{4} \right)$$

в согласии с (3.9).

Условие квантования. Квазиклассическое решение уравнения Шредингера в классически доступной области ($x_1 < x < x_2$; рис. 26) можно записать двумя способами:

один раз — сшивая осциллирующее решение с затухающим в точке x_1 , а другой раз — в точке x_2 . Требование совпадения этих двух функций и даст нам условие квантования.

Первое из решений имеет вид

$$\varphi_1 = \frac{a_1}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_{x_1}^x k dx - C_1 \pi \right),$$

где $C_1 \pi$ — фаза, которая возникает при сшивке с затухающей экспонентой для $x < x_1$. В тех случаях, когда потенциал в окрестности точки x_1 имеет линейный ход, получается, как мы видели, $C_1 = 1/4$.

Второе из решений имеет вид

$$\varphi_2 = \frac{a_2}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_x^{x_2} k dx - C_2 \pi \right).$$

Условие совпадения решений дает

$$\int_{x_1}^{x_2} k dx = (n + C_1 + C_2) \pi \quad (3.14)$$

(при этом $a_1 = a_2 (-1)^n$).

Нетрудно видеть, что $\cos \left(\int_{x_1}^x k dx - C_1 \pi \right)$ проходит через нуль n раз, т. е. n — число узлов волновой функции в интервале $[x_1, x_2]$.

Проверим правило квантования (3.14) (так называемое правило квантования Бора) на примере одномерной прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками. Так как волновая функция должна обращаться в нуль как на левой, так и на правой границах, то $C_1 = C_2 = 1/2$. Получаем

$$\int_{x_1}^{x_2} k_n dx = k_n L = (n + 1) \pi, \quad E_n = \frac{1}{2} k_n^2 = \frac{\pi^2}{2L^2} (n + 1)^2, \quad (3.15)$$

где L — длина ямы. Наинизшему состоянию соответствует число узлов $n = 0$.

В наиболее частом случае, когда потенциал имеет линейный ход как вблизи x_1 , так и вблизи x_2 , получаем правило квантования

$$\int_{x_1}^{x_2} k dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (3.16)$$

Мы увидим ниже (стр. 155), что применение квазиклассического приближения для радиальной кулоновской функции при $l = 0$ дает $C_1 = 3/4$, $C_2 = 1/4$, а при $l \neq 0$ $C_1 = C_2 = 1/4$.

ЗАДАЧА

Показать, что для потенциала, изображенного на рис. 27, условие квантования имеет вид

$$\int_{x_1}^{x_2} k dx = \left(n + \frac{3}{4} \right) \pi.$$

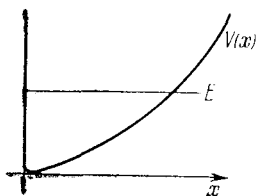


Рис. 27.

Точность квазиклассического приближения. Единственное приближение, которое мы делали при выводе наших формул, состояло в отбрасывании слагаемого

$$\frac{A''}{k^2 A} \sim \frac{A/l^2}{k^2 A} \sim \frac{1}{(kl)^2}.$$

Для оценки kl заметим, что

$$\int k dr \sim kl \sim n\pi,$$

где n — число узлов. Следовательно, квазиклассическое приближение справедливо с точностью до $1/\pi^2 n^2$ (а не $1/n$). Именно поэтому в правиле квантования Бора законно сохранять добавку $1/2$ к числу узлов n , которая представляет собой поправку $\sim 1/n$.

Такова относительная точность всех неэкспоненциальных выражений. Для волновой функции, содержащей $\exp\left(\int S' dx\right)$, относительная поправка порядка $i \int \delta S' dx \sim \sim i \frac{A''}{Ak} l \sim \frac{i}{kl}$. При вычислении матричных элементов

$(\varphi_n^*, V\varphi_m)$ для функций φ_0 и φ_1 , мало отличающихся по числу узлов n, m , поправки φ_0 и φ_1 частично сокращаются, и неточность вычисления матричного элемента будет $\sim \frac{1}{kl} \frac{n-m}{n}$.

Нормировка квазиклассических функций. Существенный вклад в нормировочный интеграл внесет лишь область $x_1 < x < x_2$ (см. рис. 26), так как вне ее волновая функция экспоненциально затухает. При $x_1 < x < x_2$ волновая функция

$$\varphi_n = \frac{a}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

следовательно,

$$\int |\varphi_n|^2 dx = 1 \approx \int_{x_1}^{x_2} \frac{a^2}{k} \cos^2 \Phi dx,$$

где

$$\Phi = \int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4}.$$

При $E = E_n$ волновая функция φ_n имеет n узлов в области $[x_1, x_2]$, так как $\int_{x_1}^{x_2} k dx$ изменяется от нуля до $(n + 1/2)\pi$ и $\cos \Phi$ будет n раз обращаться в нуль. Если n велико, то фаза Φ — большое число. Далее, $\cos^2 \Phi = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos 2\Phi$. Второе слагаемое много раз изменяет знак и поэтому внесет малый вклад. Следовательно,

$$\frac{a^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{k} = \frac{a^2}{2} \frac{T}{2} \approx 1,$$

где T — период классического движения. Итак,

$$a^2 = \frac{4}{T} = \frac{2}{\pi} \omega,$$

где ω — частота колебаний в соответствующей классической задаче. Таким образом,

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi k}} \cos \left(\int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.17)$$

ЗАДАЧА

Оценить вклад в нормировочный множитель от классически недоступной области.

О т в е т. $\omega \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^{-2/3}_{V=E}$.

Принцип соответствия. Из правила квантования (3.9) дифференцированием по n получаем

$$\pi = \frac{d\varepsilon_n}{dn} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{k} = \frac{d\varepsilon_n}{dn} \frac{\pi}{\omega},$$

откуда

$$\frac{d\varepsilon_n}{dn} = \omega. \quad (3.18)$$

Это соотношение называется принципом соответствия: при больших квантовых числах разность соседних уровней энергии равна классической частоте движения.

Средняя кинетическая энергия. Выразим среднюю кинетическую энергию частицы при квазиклассическом движении через ее полную энергию:

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \int \varphi_n^* \hat{p}^2 \varphi_n dx = -\frac{1}{2} \int \varphi_n^* \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n dx \approx \frac{1}{2} \int \varphi_n^* k^2 \varphi_n dx.$$

Дифференцирование $1/\sqrt{k}$ в $\varphi_n = \frac{a}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right)$ вносит малый вклад в $\bar{T}$. Используя принцип соответствия, получим

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{a^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} k^2 \frac{1}{k} \cos^2 \Phi dx = \frac{a^2}{4} \int_{x_1}^{x_2} k dx = \\ &= \frac{a^2}{4} \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{d\varepsilon_n}{dn}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

В случае кулоновского потенциала при $l=0$ условие квантования не содержит $1/2$ и

$$\bar{T} = \frac{1}{2} n \frac{d\varepsilon_n}{dn}.$$

Если принять во внимание теорему вириала

$$\bar{T} = \frac{1}{2} x \overline{\frac{dV}{dx}},$$

то из (3.19) можно найти собственные значения энергии в квазиклассическом случае. Например, для осциллятора $V \sim x^2$ и $x \frac{dV}{dx} = 2\bar{T}$, т. е. $\bar{T} = \bar{V}$. Следовательно,

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{d\varepsilon_n}{dn} = \varepsilon_n.$$

Решая это уравнение, получим $\varepsilon_n = C(n + 1/2)$. Из принципа соответствия следует, что $C = \omega$ — частоте классического движения, следовательно, $\varepsilon_n = (n + 1/2)\omega$. Далее, для кулоновского потенциала при $l = 0$

$$\bar{T} = -\frac{1}{2}\bar{V} = \frac{1}{2}n \frac{d\varepsilon_n}{dn}, \quad \varepsilon_n = \bar{T} - 2\bar{T} = -\frac{1}{2}n \frac{d\varepsilon_n}{dn}.$$

Решение этого уравнения есть $\varepsilon_n = C/n^2$. Мы видели (стр. 36), что из принципа соответствия следует $C = -1/2$.

Связь квазиклассических матричных элементов с компонентами Фурье классического движения. Свяжем матричный элемент $\int \varphi_n^* U(x) \varphi_{n'} dx$ одномерной задачи с компонентой Фурье от классической величины $U[x(t)]$ (например, дипольный матричный элемент

$$\int \varphi_n^* x \varphi_{n'} dx$$

можно связать с компонентой Фурье классической координаты движения $x(t)$).

Пусть n и n' не очень сильно отличаются друг от друга, именно,

$$\frac{|n' - n|}{n} \ll 1, \quad n \gg 1, \quad n' \gg 1.$$

Тогда матричный элемент

$$\begin{aligned} U_{nn'} &= \int \varphi_n^* U \varphi_{n'} dx = a_n a_{n'} \int \frac{U}{\sqrt{kk'}} \cos \Phi_n \cos \Phi_{n'} dx \approx \\ &\approx a_n^2 \int U [\cos(\Phi_n - \Phi_{n'}) + \cos(\Phi_n + \Phi_{n'})] \frac{dx}{2k}. \end{aligned}$$

Так как Φ_n и $\Phi_{n'}$ велики, то второе слагаемое в подинтегральном выражении можно отбросить из-за сильной осцилляции $\cos(\Phi_n + \Phi_{n'})$. Следовательно,

$$U_{nn'} = \frac{a_n^2}{2} \int_{x_{n1}}^{x_{n2}} U(x) \cos(\Phi_n - \Phi_{n'}) \frac{dx}{v}.$$

Так как

$$\Phi_n - \Phi_{n'} \approx \int_{x_{n1}}^x \frac{dx}{k_n} (\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}) = \frac{d\varepsilon_n}{dn} (n - n') \int_{x_{n1}}^x \frac{dx}{v} = \frac{d\varepsilon_n}{dn} (n - n') t,$$

то

$$U_{nn'} = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} U[x(t)] \cos \frac{2\pi (n - n') t}{T} dt.$$

Итак, матричный элемент величины $U(x)$ в квазиклассическом приближении равен фурье-компоненте величины $U[x(t)]$.

Критерий применимости теории возмущений для расчета не слишком малых величин. При возмущении n -го состояния дискретного спектра критерий применимости теории возмущений имеет вид

$$H' \ll E_{nm},$$

где H' — матричный элемент возмущения, а $E_{nm} = E_n - E_m$. Здесь E_n и E_m означают ближайшие уровни, для которых матричный элемент H'_{nm} не мал. Так как

$$E_{nm} \sim \frac{dE_n}{dn} \sim \frac{E_n}{n},$$

где n — число узлов волновой функции, то это условие сводится к

$$\frac{H'}{E_n} n \ll 1. \quad (3.20)$$

В квазиклассическом случае $n \gg 1$, и это условие может не выполняться. Покажем, что для вычисления не слишком малых величин его можно заменить более мягким условием:

$$\frac{H'}{E_n} \ll 1. \quad (3.21)$$

Для доказательства этого утверждения рассмотрим матричный элемент $U_{nm} = (\varphi_n | U | \varphi_m)$. Пусть $U(x)$ — плавная функция. Тогда $U_{nm} \neq 0$, лишь когда n и m мало отличаются друг от друга (иначе у подинтегральной

функции будет много узлов). Воспользовавшись квазиклассическими волновыми функциями, получаем

$$U_{nm} \approx \frac{a_n a_m}{2} \int U(x) \frac{dx}{\sqrt{k_n k_m}} \{ \cos(\Phi_n - \Phi_m) + \cos(\Phi_n + \Phi_m) \}. \quad (3.22)$$

Второе слагаемое в подинтегральном выражении для U_{nm} осциллирует $(n + m)$ раз, поэтому его вкладом можно пренебречь.

Пусть теперь к потенциалу $V(x)$ добавляется малая величина $H'(x)$. Так как $k_n = \sqrt{2[E_n - V(x)]}$, то

$$\Delta k_n = \sqrt{2[E_n - V(x) - H'(x)]} - \sqrt{2[E_n - V(x)]} \sim \frac{H'}{k_n},$$

следовательно, $\Delta k_n/k_n \sim H'/k_n^2 \sim H'/E_n$, если V не близко к E_n (иначе квазиклассика неприменима). Следовательно, условие $\Delta k_n/k_n \ll 1$ эквивалентно $H'/E_n \ll 1$, т. е. изменением k можно пренебречь при выполнении условия (3.21).

При вычислении фазы $\Phi_n = \int_{x_{n1}}^x k_n dx - \frac{\pi}{4}$ этого нельзя делать, так как $\delta\Phi_n \approx \int_{x_{n1}}^x \delta k_n dx \approx \int \frac{H'}{E_n} k_n dx \sim \frac{H'}{E_n} n$, где n — число узлов. Поэтому условие $\delta\Phi_n \ll 1$ означает $\frac{H'}{E_n} n \ll 1$; отсюда и возник критерий теории возмущений.

Однако мы видим, что для вычисления величин, содержащих $\Phi_n - \Phi_m$, при $|n - m| \sim 1$, изменение разности фаз имеет порядок

$$\delta(\Phi_n - \Phi_m) \sim \frac{H'}{E_n} (n - m) \sim \frac{H'}{E_n}.$$

Следовательно, изменение больших матричных элементов U_{nm} при возмущении потенциала на величину $H'(x)$ определяется условием $H'/E_n \ll 1$, что и нужно было показать.

Если $|n - m|$ не мало, то изучаемый матричный элемент мал из-за осцилляций $\cos(\Phi_n - \Phi_m)$.

Выясним, как изменяется квазиклассическая волновая функция $\Psi = Ae^{iS}$ при добавлении малой величины $H'(x)$

к потенциалу $V(x)$. Изменение A определяется величиной H'/E , поскольку $A \sim 1/\sqrt{k}$, а $\Delta k/k \sim H'/E$, как уже было найдено. Но $S = \int k dl$, поэтому $\delta S \sim n \frac{H'}{E}$, так что δS может быть и больше 1, хотя $H'/E \ll 1$. Изменение Ψ при добавлении H' равно:

$$\Psi + \delta\Psi \approx \Psi e^{i\delta S} \approx \Psi \exp\left(i \int \frac{H' dx}{k}\right).$$

Возмущение, вызываемое деформацией ядра, не удовлетворяет критерию (3.20), но критерий (3.21) выполняется. В этом случае для не очень малых величин можно пользоваться теорией возмущений (стр. 84).

Вычисление матричных элементов в случае сильно осциллирующих функций. Предположим, что требуется найти матричный элемент

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) f(x) \Psi_2(x) dx,$$

где $f(x)$ — медленно изменяющаяся функция, не имеющая особенностей вблизи вещественной оси. Пусть состояния 1 и 2 сильно отличаются по энергии и, следовательно, подинтегральная функция сильно осциллирует. Матричные элементы такого типа возникают в задаче о возбуждении системы пролетающей частицей. Мы видели при рассмотрении далеких коэффициентов Фурье, что эти матричные элементы экспоненциально малы. Как будет показано, во многих случаях матричный элемент определяется поведением Ψ_1 , Ψ_2 вблизи особой точки потенциала в комплексной плоскости x . Вблизи этой особой точки квазиклассическое приближение неприменимо, и для получения количественного результата требуется сшить точное решение вблизи особой точки с квазиклассическим вдали, и только после этого применять метод перевала, которым мы будем ниже пользоваться. Однако такое уточнение повлияет лишь на численный множитель в предэкспоненциальном выражении. Показатель экспоненты и порядок величины предэкспоненциального множителя могут быть найдены и с помощью квазиклассического приближения. С аналогичным обстоятельством мы столкнемся ниже в задаче о надбарьерном отражении.

Итак, возьмем функции Ψ_1, Ψ_2 в квазиклассическом приближении и постараемся использовать метод перевала (Ландау, 1932). Будем считать функции Ψ_1, Ψ_2 вещественными и нормированными на единичную амплитуду при $x \rightarrow \infty$

$$\Psi_{1,2} = \sqrt[4]{\frac{E_{1,2}}{E_{1,2} - V_{1,2}}} \cos \left(\int_{a_{1,2}}^x k_{1,2} dx - \frac{\pi}{4} \right).$$

Точка $x = a_{1,2}$ соответствует условию $E_{1,2} = V_{1,2}$. Разобьем функцию Ψ_1 на два комплексно сопряженных слагаемых $\Psi_1^{+,-}$, соответствующих асимптотическим выражениям $\Psi_1^+ \sim e^{iS_1}$, $\Psi_1^- \sim e^{-iS_1}$. Матричный элемент I определится как сумма интегралов $I^+ + I^-$. Если $E_1 > E_2$, то при вычислении I^+ можно деформировать контур в верхнюю полуплоскость, а при вычислении I^- — в нижнюю. Действительно, при $x \rightarrow i\xi$ функция $\exp iS_1 \rightarrow \exp(-\sqrt{2E_1}\xi)$, тогда как растущее слагаемое в Ψ_2 содержит $\exp \sqrt{2E_2}\xi$.

Найдем интеграл I^+ . Как мы видели на стр. 128 в верхней полуплоскости имеем

$$\Psi_1^+ = \frac{1}{2i} \sqrt[4]{\frac{E_1}{V_1 - E_1}} \exp \int_z^{a_1} \sqrt{2(V_1 - E_1)} dz,$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{2} \sqrt[4]{\frac{E_2}{V_2 - E_2}} \exp \left(- \int_z^{a_2} \sqrt{2(V_2 - E_2)} dz \right).$$

При вещественном z берется положительный знак корней. Выражение для I^+ принимает вид

$$I^+ = \frac{\sqrt[4]{E_1 E_2}}{4} \int \frac{dz}{\sqrt[4]{(V_1 - E_1)(V_2 - E_2)}} \exp \Phi(z),$$

где

$$\Phi(z) = \int_z^{a_1} \sqrt{2(V_1 - E_1)} dz - \int_z^{a_2} \sqrt{2(V_2 - E_2)} dz.$$

Для применения метода перевала следует найти ближайшую к вещественной оси стационарную точку (точка экстремума показателя экспоненты) и затем провести че-

рез нее кривую постоянной мнимой части показателя экспоненты. Вдоль этой кривой, как это легко видеть из соотношений Коши, вещественная часть показателя убывает в обе стороны от стационарной точки. Следует убедиться, что контур интегрирования можно совместить с кривой постоянной мнимой части, не задевая особых точек (в противном случае придется добавить еще интегралы по петлям, обходящим особые точки). После такой деформации контура значение интеграла определяется областью интегрирования, прилегающей к стационарной точке, и в простейшем случае сводится к Гауссовому интегралу.

Стационарная точка определяется соотношением $\frac{d\Phi}{dz} = 0$ или

$$\sqrt{V_1 - E_1} = \sqrt{V_2 - E_2}.$$

Предположим, что обе Ψ -функции соответствуют движению в одном и том же потенциале $V_1 = V_2 = V$. Тогда стационарная точка z_0 совпадает с точкой, где $V(z_0) = \infty$. Благодаря этому обстоятельству процедура применения метода перевала несколько изменяется. Предположим, что z_0 есть полюс V , т. е. $V = A/(z - z_0)$. Показатель экспоненты вблизи стационарной точки имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi(z) &= \Phi(z_0) - \sqrt{2} \int_{z_0}^z (\sqrt{V - E_1} - \sqrt{V - E_2}) dz \simeq \\ &\simeq \Phi(z_0) + \frac{2}{3\sqrt{2}} \frac{E_1 - E_2}{\sqrt{A}} (z - z_0)^{3/2}. \end{aligned}$$

Точка $z = z_0$ является точкой ветвления функции $\Phi(z)$. Чтобы сделать $\Phi(z)$ однозначной, проведем разрез от $z = z_0$ до $z = i\infty$. При $E_1 > E_2$ функция $\Phi(z)$ имеет отрицательную вещественную часть и $\exp \Phi$ экспоненциально убывает при $\text{Im } z \rightarrow \infty$. При больших z , $\Phi(z) \rightarrow i(\sqrt{2E_1} - \sqrt{2E_2})z$ и начало и конец кривой $\text{Im } \Phi = \text{const}$ идут параллельно мнимой оси. В точке $z = z_0$ кривая постоянной мнимой части имеет излом.

Действительно, рассмотрим сначала случай, когда вычет A — положительное число (например, для кулоновского потенциала, когда $A = Z$). Пусть $E_1 > E_2$, тогда

кривая постоянной мнимой части $\Phi(z)$ вблизи z_0 определяется требованием отрицательности величины $(z - z_0)^{3/2} = \rho^{3/2} e^{\frac{3i\psi}{2}}$, откуда $\psi = \pm \frac{2\pi}{3}$.

Заметим, что при $A > 0$ углы следует отсчитывать от линии, на которой $(z - z_0)$ вещественно и положительно, поскольку $\sqrt{V - E}$ по определению положителен при вещественном и положительном $V - E$.

Примерный ход кривой $\text{Im} [\Phi(z) - \Phi(z_0)] = 0$ дается на рис. 28, а). Жирная линия изображает разрез. Когда

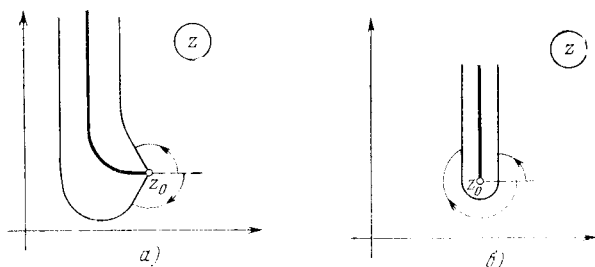


Рис. 28.

$\sqrt{A}$ — комплексное число, кривая вблизи z_0 поворачивается. Так, например, для потенциала $V = \frac{V_0}{1 + x^2}$ вычит $A = \frac{V_0}{2i}$ и, как нетрудно видеть, кривая вблизи z_0 поворачивается вокруг точки z_0 на угол $-\pi/6$.

Для пояснения метода перевала применительно к рассматриваемому случаю заметим следующее. Разумеется, интеграл по кривой постоянной мнимой части совпадает с интегралом по контуру рис. 28, б), поскольку один контур можно деформировать в другой, не задевая особых точек. Однако интеграл по этому контуру не определяется окрестностью точки z_0 и поэтому не может быть вычислен в общем случае. Действительно, на правом берегу разреза $\psi = \pi/2$ и $(z - z_0)^{3/2} = \rho^{3/2} \left(\cos \frac{3\pi}{4} + i \sin \frac{3\pi}{4} \right)$. Поскольку вещественная часть показателя отрицательна, интеграл определяется окрестностью точки z_0 . Однако на левом

берегу $\psi = -\frac{3}{2}\pi$ и $(z - z_0)^{3/2} = \rho^{3/2} \left(\cos \frac{\pi}{4} - i \sin \frac{\pi}{4} \right)$, вещественная часть показателя положительна и интеграл определяется поведением $\Phi(z)$ вдали от точки z_0 .

Интересующий нас интеграл I^+ определяется окрестностью точки z_0 и может быть записан в виде

$$I^+ \cong \frac{\sqrt[4]{E_1 E_2}}{4 \sqrt{A}} e^{\Phi(z_0)} f(z_0) \int dz (z - z_0)^{1/2} \times \\ \times \left[1 + \frac{E_1 + E_2}{4A} (z - z_0) \right] \left[1 + \left(\frac{df}{dz} \frac{1}{f} \right)_{z_0} (z - z_0) \right] \exp \alpha (z - z_0)^{3/2},$$

$$\text{где } \alpha = \frac{2}{3 \sqrt{2A}} (E_1 - E_2).$$

Мы использовали первые два члена разложения подинтегрального выражения вблизи z_0 . Интегрирование по кривой постоянной мнимой части вблизи z_0 соответствует замене $z - z_0 = \rho e^{i\psi_1}$ и $z - z_0 = \rho e^{i\psi_2}$ до и после излома, где $\psi_1 = -\frac{2\pi}{3}$, $\psi_2 = \frac{2\pi}{3}$. Первый член в квадратной скобке подинтегрального выражения, как легко видеть, выпадает (соответствующие интегралы до и после излома в точности сокращаются). Получаем

$$I^+ = \frac{\sqrt[4]{E_1 E_2}}{4 \sqrt{A}} e^{\Phi(z_0)} f(z_0) \left[\frac{E_1 + E_2}{4A} + \left(\frac{df}{dz} \frac{1}{f} \right)_{z_0} \right] \int_0^\infty e^{-\alpha \rho^{3/2}} \rho^{3/2} d\rho,$$

или

$$I^+ \sim i \sqrt[4]{E_1 E_2} \left[\frac{E_1 + E_2}{4A} + \left(\frac{df}{dz} \frac{1}{f} \right)_{z_0} \right] \frac{A^{1/3}}{(E_1 - E_2)^{5/3}} f(z_0) e^{\Phi(z_0)}.$$

Аналогично вычисляется I^- , соответствующий контур интегрирования лежит теперь в нижней полуплоскости. Если $f(x)$ вещественна, то $I^- = (I^+)^*$ и, следовательно, $I = 2\text{Re} I^+$. Критерий применимости полученного выражения определяется из условия малости следующих членов разложения Φ по $z - z_0$.

Найдем $\Phi(z_0)$ для двух случаев: для случая кулоновского потенциала $V_Q = \frac{Z}{|x|}$ и для потенциала вида

$$V_R(x) = \frac{V_0}{1 + e^{\alpha(x^2 - a^2)}}.$$

При $\alpha a^2 \rightarrow \infty$ потенциал V_R переходит в прямоугольный барьер высоты V_0 и ширины $2a$.

Вычислим сначала величину $\Phi_1 = \int_{z_0}^a \sqrt{2(V-E)} dz$.

Введем переменную $\xi = E/V$. Тогда Φ_1 запишется в виде

$$\Phi_1 = \sqrt{2E} \int_0^1 \sqrt{1-\xi} \frac{1}{\xi^{1/2}} \frac{d\xi}{d\xi/dz}.$$

В случае кулоновского потенциала имеем $z_0 = 0$, $\xi = \frac{E}{Z} z$, $\Phi_1 = \frac{\pi Z}{\sqrt{2E}}$ и, следовательно, $\Phi(0) = -\pi Z \left(\frac{1}{v_2} - \frac{1}{v_1} \right)$.

В случае потенциала V_R ближайшая к вещественной оси особая точка в верхней полуплоскости есть полюс, который определяется условием

$$e^{\alpha(z_0^2 - a^2)} = e^{\pm i\pi}.$$

Предполагая, что $\alpha a^2 \gg 1$, получаем

$$z_0 = \pm a + \frac{i\pi}{2a\alpha}.$$

Как мы увидим, наибольший вклад внесет полюс $z_0 = a + \frac{i\pi}{2a\alpha}$. Вблизи этого полюса переменная ξ связана с z соотношением

$$\xi = \xi_0 (1 + e^{\beta(z-a)}),$$

где $\xi_0 = \frac{E}{V_0}$, $\beta = 2a\alpha$.

Для Φ_1 получаем

$$\Phi_1 = \frac{\sqrt{2E}}{\beta} \int_0^1 \sqrt{\frac{1}{\xi} - 1} \frac{d\xi}{\xi - \xi_0}.$$

Для вычисления этого интеграла обозначим $\sqrt{\frac{1}{\xi} - 1} = t$ и предположим, что $\xi_0 > 1$. Имеем

$$I = \int_0^1 \sqrt{\frac{1}{\xi} - 1} \frac{d\xi}{\xi - \xi_0} = 2 \int_0^\infty \frac{t^2 dt}{(1+t^2)(1-\xi_0(1+t^2))}.$$

Перейдем к интегрированию от $-\infty$ до $+\infty$ и сдвинем контур в верхнюю полуплоскость. Интеграл сводится к сумме вычетов в полюсах $t_1 = i$ и $t_2 = i\sqrt{1 - \frac{1}{\xi_0}}$. Находим

$$I = \pi \left(\sqrt{1 - \frac{1}{\xi_0}} - 1 \right),$$

откуда получаем Φ_1 при $\xi_0 > 1$ ($E > V_0$)

$$\Phi_1 = \frac{\pi \sqrt{2}}{\beta} (\sqrt{E - V_0} - \sqrt{E}).$$

К случаю $V_0 > E$ следует переходить, двигаясь по окружности вокруг точки $E = V_0$ в верхней полуплоскости, т. е. заменяя $E - V_0$ на $|E - V_0| e^{i\pi}$. Поэтому при $E < V_0$ находим

$$\Phi_1 = -\frac{\pi \sqrt{2}}{\beta} \sqrt{E} + \frac{i\pi \sqrt{2}}{\beta} \sqrt{V_0 - E}.$$

Когда оба состояния Ψ_1, Ψ_2 имеют энергию, меньшую чем высота барьера ($E_1, E_2 < V_0$), $\Phi(z_0)$ равно

$$\Phi(z_0) = -\frac{\pi \sqrt{2}}{\beta} (\sqrt{E_1} - \sqrt{E_2}) + \frac{i\pi \sqrt{2}}{\beta} (\sqrt{V_0 - E_1} - \sqrt{V_0 - E_2}).$$

Существенно, что в отличие от кулоновского случая экспоненциальная малость матричного элемента определяется не проницаемостью всего барьера, а проницаемостью узкого переходного слоя шириной $\sim 1/\beta$. При $\beta \rightarrow \infty$ особая точка переходит на вещественную ось и матричный элемент содержит только степенные члены (нет экспоненциальной малости).

Прохождение через барьер. Возможны две постановки задачи о прохождении частицы через потенциальный барьер. Одна из них соответствует случаю, когда на потенциальный барьер падает стационарный поток частиц. Требуется найти амплитуды проходящей и отраженной волн. Физическим примером может служить задача о холодной эмиссии электронов металла под действием приложенного к металлу электрического поля. Возникает стационарный поток электронов, проходящих через потенциальный барьер (см. предлагаемую ниже задачу).

Другая постановка задачи соответствует случаю, когда в начальный момент времени частица находится внутри потенциальной ямы и требуется найти ее состояние через время t , т. е., в частности, амплитуду вероятности ее обнаружения через время t в начальном состоянии. Физическим примером является задача об α -распаде, когда в результате какой-либо ядерной реакции возникает материнское ядро, которое затем распадается на дочернее и α -частицу *).

Рассмотрим сначала стационарную постановку задачи. Предположим, что частицы падают слева. Тогда решение при $x \rightarrow \pm \infty$ имеет вид

$$\begin{aligned}\Psi &= e^{ikx} + ae^{-ikx}, \\ &\quad x \rightarrow -\infty \\ \Psi &= be^{ikx}, \\ &\quad x \rightarrow \infty\end{aligned}$$

Коэффициенты a и b (амплитуды отраженной и проходящей волн) связаны соотношением, вытекающим из закона сохранения числа частиц

$$1 - |a|^2 = |b|^2.$$

При малой проницаемости барьера ($|b| \rightarrow 0$) решение слева от барьера близко к стоячей волне. Мы предположили, что потенциал достаточно быстро убывает при $x \rightarrow \pm \infty$. Если потенциал стремится к разным значениям при $x \rightarrow \infty$, $x \rightarrow -\infty$, то единственное изменение состоит в том, что импульс проходящей волны отличается от импульса падающей, и условие постоянства тока даст $1 - |a|^2 = |b|^2 \frac{k'}{k}$, где k' — импульс проходящей волны, а k — падающей.

Коэффициенты a и b можно получить, сшивая квазиклассические решения внутри и вне барьера с помощью формул (3.9), приведенных на стр. 127.

Очень полезно сначала найти коэффициенты a и b для случая прямоугольного барьера. Хотя эта задача решается во многих книгах по квантовой механике, рекомендуем читателю проделать это вычисление самостоятельно.

*) Эта постановка вопроса впервые анализировалась в работе: Н. С. Крылов, В. А. Фок, ЖЭТФ 17, 93 (1947).

Рассмотрим случай слабопроницаемого барьера ($|b| \rightarrow 0$). Как видно из формул (3.9), решение внутри барьера после сшивки на правой границе (см. рис. 29) имеет вид

$$\Psi_{II} = be^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k_0}{|k|}} \frac{1}{i} \left\{ \exp \int_x^{x_2} |k| dx + \frac{i}{2} \exp \left(- \int_x^{x_2} |k| dx \right) \right\},$$

где k_0 — импульс на бесконечности. Вблизи $x = x_1$ второе слагаемое будет экспоненциально меньше первого и,

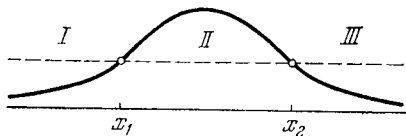


Рис. 29.

следовательно, мало повлияет на условие сшивки на границе I, II. Изображая решение внутри барьера в виде

$$\frac{B}{\sqrt{|k|}} \exp \left(- \int_{x_1}^x |k| dx \right), \quad \text{где } B = be^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{k_0} \exp \left(\int_{x_1}^{x_2} |k| dx \right),$$

получим после сшивки в точке $x = x_1$ решение слева

$$\Psi_I = \frac{2B}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right).$$

Требуя, чтобы коэффициент при падающей волне равнялся 1, получаем

$$|b|^2 = e^{-2\gamma}, \quad |a|^2 = 1 - e^{-2\gamma},$$

где $\gamma = \int_{x_1}^{x_2} |k| dx$. Величина $e^{-2\gamma}$ обычно называется проницаемостью барьера.

Упомянутая выше задача о холодной эмиссии электронов сводится к вычислению проницаемости барьера, изображенного на рис. 30. Глубина потенциальной ямы для электронов металла дается величиной V_0, V_a — разность потенциалов между катодом (металл) и анодом.

В области $0 - x_a$ потенциал равен $V(x) = -Ex = -\frac{V_a}{x_a}x$.

Предлагается найти проницаемость барьера.

Перейдем теперь ко второй постановке задачи о прохождении частицы через барьер. Пусть частица в начальный момент находится в состоянии, близком к какому-либо стационарному состоянию, которое получилось бы при непроницаемом барьере (например при барьере,

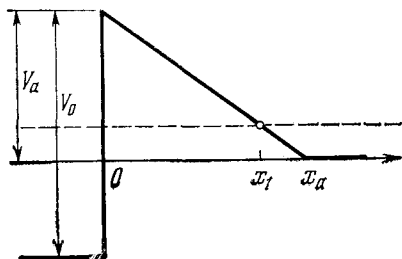


Рис. 30.

приподнятом вдали от ямы на высоту большую, чем энергия вылетающей частицы). Поскольку частица имеет положительную энергию E_0 , ее состояние описывается суперпозицией собственных функций сплошного спектра, и проблема сводится к

задаче о расплывании волнового пакета. Так как состояние сделалось нестационарным только благодаря проницаемости барьера, то для слабо проницаемого барьера волновой пакет, отвечающий начальному состоянию, будет расплываться медленно. Соответствующий такому состоянию уровень называется квазистационарным (см. стр. 187).

Разложим начальное состояние, описывающее частицу внутри ямы, по собственным функциям сплошного спектра

$$\Psi_0(x) = \int_0^{\infty} C(E) \Psi_E(x) dE,$$

где
$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_E(x) \Psi_{E'}(x) dx = \delta(E - E').$$

Волновая функция в момент t будет

$$\Psi(x, t) = \int_0^{\infty} C(E) e^{-iEt} \Psi_E(x) dE.$$

Определим амплитуду вероятности нахождения частицы в состоянии Ψ_0 через время t

$$\mathcal{L}(t) = (\Psi(x, t); \Psi_0(x)) = \int_0^{\infty} |C(E)|^2 e^{-iEt} dE.$$

Как мы увидим ниже (стр. 193) при энергии E , близкой к E_0 , функции сплошного спектра вблизи ямы имеют вид

$$\Psi_E = \chi(E) \Psi_0(x),$$

т. е. разбиваются на произведение функции от энергии $\chi(E)$ на функцию Ψ_0 , описывающую стационарное состояние в случае непроницаемого барьера. При этом функция $\chi(E)$ имеет полюс в комплексной плоскости E при $E = E_0 - i\Gamma_0$. Ширина квазистационарного уровня Γ_0 пропорциональна проницаемости барьера. Нетрудно связать $\chi(E)$ с величиной $C(E)$, характеризующей распределение начального состояния по энергии. Действительно

$$C(E) = \int \Psi_E^*(x) \Psi_0(x) dx = \chi^*(E).$$

Вернемся к вычислению величины $\mathcal{L}(t)$, определяющей вероятность застать частицу в исходном состоянии. Так как функция $C(E)$ имеет полюс вблизи вещественной оси и удовлетворяет условию нормировки, то для $|C(E)|^2 = |\chi(E)|^2$ приближенно имеем

$$|C(E)|^2 \simeq \frac{\Gamma_0}{(E - E_0)^2 + \Gamma_0^2} \frac{1}{\pi}.$$

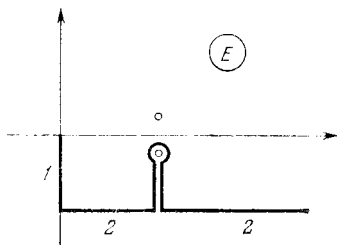


Рис. 31.

Сместим контур интегрирования в $\mathcal{L}(t)$ в нижнюю полуплоскость (см. рис. 31). Интегрирование по участкам 2 дает вклад, экспоненциально падающий при смещении контура в нижнюю полуплоскость. Остается вычет в полюсе и интеграл по отрицательной мнимой оси.

В результате имеем

$$\mathcal{L}(t) = e^{-iE_0 t} e^{-\Gamma_0 t} - i \int_0^\infty |C(-i\xi)|^2 e^{-\xi t} d\xi.$$

При больших t второе слагаемое определяется поведением $|C(E)|^2$ при малых энергиях. Для того, чтобы оценить величину $|C(E)|^2$ в этом случае, нужно задаться способом приготовления начального состояния. Для определенности будем говорить об α -распаде и рассмотрим какую-либо реакцию, приводящую к образованию материнского ядра, которое затем будет распадаться на дочернее и α -частицы с энергией E_0 . Наряду с этим будет происходить и прямое образование дочерних ядер и α -частиц в ходе самой реакции. Присутствие в спектральном разложении начального состояния α -частиц с энергией $\frac{E-E_0}{\gamma} \gg 1$ как раз и соответствует тем дочерним ядрам и α -частицам, которые возникли в процессе приготовления начального состояния (в ходе реакции). Число частиц с энергией E вдали от E_0 пропорционально проникаемости барьера $e^{-2\gamma(E)}$ и в случае трехмерной задачи — статистическому весу конечного состояния, т. е. $\sim k^2 \frac{dk}{dE} \sim \sqrt{E}$. Число α -частиц малой энергии, возникших в процессе реакции, равно

$$|C(E)|^2 = A \sqrt{E} e^{-2\gamma(E)}.$$

При $E \sim E_0$ это выражение должно переходить в приведенную выше формулу. Вводя величину $\Gamma(E)$ можно записать $|C(E)|^2$ в виде, пригодном и при малых энергиях

$$|C(E)|^2 = \frac{\Gamma(E)}{(E-E_0)^2 + \Gamma^2(E)},$$

$$\Gamma(E) \simeq \sqrt{EE_0} e^{-2\gamma(E)}.$$

Теперь нетрудно оценить добавочное слагаемое в $\mathcal{L}$. В случае α -распада проникаемость барьера при $E \rightarrow 0$ стремится к $e^{-2\gamma(E)} = \exp\left(-\frac{2\pi Z}{v}\right)$, поэтому при $t \rightarrow \infty$ интеграл может быть найден методом перевала. Рекомендуются читателю убедиться, что порядок величины

второго слагаемого в $\mathcal{L}$ дается величиной

$$|\mathcal{L}_1| \sim \sqrt{E_0} \frac{Z^{2/3}}{t^{1/3}} \exp \left[-\frac{(2\pi)^{1/3} 3 \sqrt{3}}{4} Z^{1/3} t^{1/3} \right].$$

Для случая, когда проницаемость барьера при $E \rightarrow 0$ стремится к конечному пределу, имеем

$$|\mathcal{L}_1| \sim e^{-2\gamma(0)} \sqrt{E_0/t^{3/2}}.$$

Как видно из приведенных выражений добавочное слагаемое описывает распыление волнового пакета α -частиц, образовавшихся в ходе реакции, и не имеет никакого отношения к процессу распада материнских ядер. Если определять число материнских и дочерних ядер не по числу α -частиц, а, скажем, по характеру атомных спектров, то так определенное число материнских ядер будет убывать по закону $e^{-2\gamma_0 t}$. Действительно, если в какой-либо момент установлено, что атомный спектр соответствует материнскому ядру, то тем самым определена его энергия с точностью до ширины атомных линий и, следовательно, в спектральном разложении α -частиц отсутствуют слагаемые с малой энергией, т. е. при больших t остается только первое слагаемое $\mathcal{L}^*$).

Надбарьерное отражение. Решим задачу об отражении частицы при движении с энергией, большей высоты барьера, так что везде выполняется критерий квазиклассического приближения. Легко увидеть, что ни в каком приближении по параметру квазиклассичности $1/(kl)^2$ не возникает отраженной волны. Действительно, квазиклассическое приближение, соответствующее идущей направо волне, имеет вид

$$A \exp \left[i \int_{x_1}^x \sqrt{k^2 + A''/A} dx \right].$$

Разлагая это решение по степеням A''/A , получим всюду только волны, идущие вправо.

*) Более подробный анализ и ссылки на предшествующие работы содержатся в статье A. Degasperis, L. Fonda, G. Ghirardi, Nuovo Cimento, 21A, L 71 (1974).

Причина этого результата в том, что коэффициент отражения экспоненциально падает с увеличением $(kl)^2$, между тем как квазиклассическое решение есть асимптотический ряд и экспоненциально малые добавки в нем полностью теряются.

Целесообразно искать решение уравнения Шредингера

$$\Psi'' + k^2(x)\Psi = 0 \quad (3.23)$$

в виде

$$\Psi = \sqrt{\frac{k_0}{k}} \exp\left(i \int_{-\infty}^x k dx\right) + \varphi,$$

где φ — малая добавка, содержащая отраженную волну. Тогда получаем

$$\varphi'' + k^2\varphi = f(x),$$

где

$$f(x) = -\left(\sqrt{\frac{k_0}{k}}\right)' \exp\left[i \int_{-\infty}^x k dx\right].$$

Выразим решение этого неоднородного уравнения через два решения соответствующего однородного уравнения Ψ_1 и Ψ_2 (Ψ_1 и Ψ_2 — волны, идущие соответственно вправо и влево):

$$\varphi = \frac{1}{\Delta} \left\{ \Psi_1 \int^x \Psi_2 f dx - \Psi_2 \int^x \Psi_1 f dx \right\},$$

где

$$\Delta = \Psi_1' \Psi_2 - \Psi_1 \Psi_2' = \text{const}$$

— определитель Вронского.

Итак, решение уравнения Шредингера (3.23) имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi(x) = \sqrt{\frac{k_0}{k}} \exp\left[i \int_{-\infty}^x k dx\right] + \\ + \frac{1}{\Delta} \left\{ \Psi_1 \int_{-\infty}^x \Psi_2 f dx - \Psi_2 \int_{-\infty}^x \Psi_1 f dx \right\}. \end{aligned}$$

Пределы интегрирования определяются из следующих соображений: при $x \rightarrow \infty$ должна оставаться только вол-

на, идущая вправо; это обеспечивается функцией Ψ_1 . При $x \rightarrow -\infty$ функция $\varphi(-\infty)$ должна содержать только отраженную волну. Действительно, при указанном выборе нижнего предела

$$\Psi(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{=} e^{ik_0 x + i\alpha} + \frac{1}{\Delta} e^{-ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1 f dx.$$

Так как $\Delta = \text{const}$, можно вычислить Δ при $x \rightarrow \infty$. Функция $\Psi_1 \rightarrow e^{ik_0 x}$, а функция Ψ_2 в силу малого коэффициента отражения приближенно стремится к $e^{-ik_0 x + i\alpha}$. Отсюда $|\Delta| = 2k_0$.

Таким образом, коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{1}{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1 f dx \right|^2 = \left| \frac{1}{2k_0} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1 f dx \right|^2. \quad (3.24)$$

Заметим, что в (3.24) не используется квазиклассическое приближение.

Если $V \ll E$, то из (3.24) получается обычная формула теории возмущений. Действительно, величина $\left(\sqrt{\frac{k_0}{k}} \right)' =$

$= -\frac{V \sqrt{k_0}}{2 \sqrt{k^3}} k'$. Так как $k = \sqrt{2(E - V)}$, то $k' = -V'/k$, сле-

довательно, $f = -\left(\sqrt{\frac{k_0}{k}} \right)'' e^{iS} \approx \frac{V''}{2k_0^2} e^{ik_0 x + i\alpha}$ и

$$R = \left| \frac{1}{4k_0^3} \int_{-\infty}^{\infty} V'' e^{2ik_0 x} dx \right|^2.$$

Интегрируя дважды по частям, получим выражение для коэффициента отражения, совпадающее с тем, что получается по теории возмущений:

$$R = \left| \frac{1}{k_0} \int_{-\infty}^{\infty} V e^{2ik_0 x} dx \right|^2.$$

Величина R определяется поведением $\Psi_1 f$ в окрестности ближайшей к вещественной оси особой точки. Показатель экспоненты в R определяется расстоянием этой особой точки до вещественной оси. Для нахождения

предэкспоненциального множителя необходимо использовать точное решение для Ψ вблизи особой точки*) аналогично тому, как это делалось при сшивке квазиклассических волновых функций (см. также замечание на стр. 96).

2. ТРЕХМЕРНАЯ ЗАДАЧА

Центрально-симметричное поле. Рассмотрим квазиклассическое движение в центрально-симметричном поле. Переменные θ, φ в этом случае отделяются от переменной r :

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Рассмотрим сначала радиальную часть волновой функции. Введем функцию

$$u_{nl}(r) = rR_{nl}(r).$$

Из ограниченности $R_{nl}(r)$ при $r = 0$ следует, что $u_{nl}(0) = 0$. Для u_{nl} , как известно, получается одномерное уравнение

$$u_{nl}'' + k_{nl}^2 u_{nl} = 0,$$

где

$$k_{nl}^2 = 2 \left[\varepsilon_{nl} - V(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right].$$

Условие $u_{nl}(0) = 0$ соответствует в одномерной задаче бесконечной потенциальной стенке в начале координат.

При увеличении l и заданном $V(r)$ яма на рис. 32, б становится все мельче и в конце концов исчезает, т. е. при достаточно большом l система не будет обладать дискретными уровнями. Значениям $\varepsilon_{nl} > 0$ соответствует сплошной спектр.

Модификация центробежного потенциала. Покажем, что при использовании квазиклассического приближения в центробежном потенциале следует произвести замену $l(l+1) \rightarrow (l + 1/2)^2$ (поправка Лангера).

Рассмотрим область вблизи начала координат. В этой области существен лишь центробежный потенциал и, следовательно, $k \sim \frac{\sqrt{l(l+1)}}{r}$. Тогда $\frac{d\lambda}{dr} \sim \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}}$. При не-

*) В. Л. Покровский, И. М. Халатников, ЖЭТФ 40, 1713 (1961).

больших l , $\frac{d\lambda}{dr} \sim 1$, т. е. условие квазиклассичности не выполняется вблизи начала координат.

Покажем, как получить решение, пригодное вблизи начала координат при любых l . Для этого в уравнении Шредингера произведем замену независимой переменной $r = e^{-x}$ и функции $u = w e^{-\frac{x}{2}}$. Уравнение приобретает вид:

$$\frac{d^2 w}{dx^2} + 2 \left[(\epsilon_{nl} - V) e^{-2x} - \frac{(l + 1/2)^2}{2} \right] w = 0.$$

Точка $r = 0$ переходит в $x = \infty$. Условие квазиклассичности при $x \rightarrow \infty$ выглядит так:

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2(\epsilon_{nl} - V) e^{-2x} - (l + 1/2)^2}} \sim e^{-2x} \rightarrow 0.$$

Итак, $\frac{d\lambda}{dx} \ll 1$ независимо от величины l . Если теперь в терминах переменной x сформулировать правило квантования Бора, а затем преобразовать его к переменной r , то оно приобретет обычный вид, с той разницей, что теперь $V_{\text{эфф}} = V + \frac{(l + 1/2)^2}{2r^2}$.

После такой замены в задаче определения энергетических уровней из правила квантования Бора критерий применимости квазиклассического метода состоит лишь в условии $n_r \gg 1$ (т. е. радиальная функция должна иметь много узлов), а требования $l \gg 1$ нет. Разумеется, при $l = 0$ такой поправки добавлять не следует.

Уровни энергии в кулоновском поле. Найдём уровни энергии в кулоновском поле. Условие квантования имеет вид (при $l \neq 0$, рис. 32, б)

$$\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2 \left(E_n + \frac{Z}{r} - \frac{(l + 1/2)^2}{2r^2} \right)} dr = \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \pi.$$

Здесь n_r — радиальное квантовое число, $r_{\min}$, $r_{\max}$ — квазиклассические точки поворота. Мы заменили в центробежном потенциале $l(l + 1) \rightarrow (l + 1/2)^2$. Интеграл

в левой части приведенного выше условия равен

$$\frac{Z\pi}{\sqrt{-2E_n}} - \left(l + \frac{1}{2}\right)\pi.$$

Следовательно,

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2},$$

где $n = n_r + l + 1$ — главное квантовое число.

При $l = 0$ (рис. 32, а) левая точка поворота $r_{\min} = 0$ и совпадает с особой точкой уравнения, т. е. в области

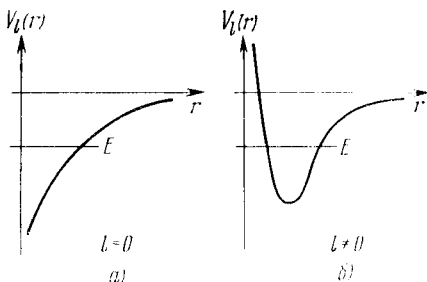


Рис. 32.

левой точки поворота потенциал нельзя заменить прямой линией, как мы делали выше. Поэтому условие сшивки на левом краю изменится.

Для нахождения энергетических уровней при $l = 0$ нужно найти точное решение вблизи особой точки и сплечь его с квазиклассическим решением вдали от нее.

Для больших квантовых чисел (т. е. энергий, близких к нулю) волновая функция в кулоновском поле с $l = 0$ имеет вид *)

$$R_{n0} = a_1 Z^{3/2} \frac{J_1(\sqrt{8Zr})}{\sqrt{Zr}},$$

где a_1 — нормировочный коэффициент. При $r \gg 1/Z$ отсюда находим

$$R_{n0} = a_0 \frac{\cos(\sqrt{8Zr} - 3/4\pi)}{r^{3/4}}.$$

*) Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 153.

С другой стороны, для R_{n0} можно написать квазиклассическое решение

$$R_{n0} = a_2 \frac{\cos \left(\int_0^r p_r dr - C_{1\pi} \right)}{r \sqrt{p_r}} = a_2 \frac{\cos (V\overline{8Zr} - C_{1\pi})}{r \sqrt{p_r}}.$$

Таким образом, здесь появляется фаза $C_{1\pi} = 3/4 \pi$ вместо $1/4 \pi$ в обычном случае.

Функция R_{n0} может быть также записана в виде

$$R_{n0} = a_3 \frac{\cos \left(\int_r^{r_{\max}} p_r dr - \pi/4 \right)}{r \sqrt{p_r}}.$$

Здесь $r_{\max}$ — правая точка поворота. Из условия однозначности, так же как и в 3.1, получаем правило квантования

$$\int_0^{r_{\max}} p_r dr = (n_r + 1) \pi = n\pi,$$

где n — главное квантовое число.

Вычисление интеграла даст

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}.$$

Как мы видим, в этом случае квазиклассическое приближение (так же как и в случае осциллятора) дает точные уровни энергий.

Квазиклассическое представление сферических функций. Для вычисления матричных элементов физических величин при больших угловых моментах l удобно использовать квазиклассическое представление для сферической функции:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

Здесь $P_{lm}(x)$ — присоединенный полином Лежандра, удовлетворяющий уравнению

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_{lm}}{dx} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_{lm} = 0.$$

Введем функцию $\vartheta_{lm}(x)$:

$$P_{lm}(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \vartheta_{lm}(x).$$

Тогда для $\vartheta_{lm}(x)$ имеем

$$(1-x^2) \vartheta_{lm}''(x) + \left[l(l+1) - \frac{m^2-1}{1-x^2} \right] \vartheta_{lm}(x) = 0.$$

Решение этого уравнения с точностью порядка $1/l^2$ может быть найдено в квазиклассическом виде

$$\vartheta_{lm}(x) = \frac{a}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

где

$$k^2(x) = \frac{1}{1-x^2} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{m^2}{1-x^2} \right].$$

В точках $x_{1,2}$ величина $k(x)$ обращается в нуль, т. е.

$$x_{1,2} = \mp \sqrt{1 - \frac{m^2}{(l+1/2)^2}}.$$

Мы заменили здесь $l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$, имея в виду, что квазиклассическое приближение применимо с точностью до $1/l^2$, а не $1/l$ (см. стр. 131).

Коэффициент a определяется из условия нормировки присоединенных полиномов Лежандра:

$$\int_{-1}^1 P_{lm}^2(x) dx = 1,$$

т. е.

$$\frac{a^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{1-x^2} \frac{dx}{k} = 1 = \frac{a^2}{2} \frac{1}{l+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial l} \int_{x_1}^{x_2} k dx.$$

Вычислим $\int_{x_1}^{x_2} k dx$:

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{1}{(1-x^2)^2} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{m^2}{1-x^2} \right]} dx = \left(l - |m| + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (3.25)$$

Этот результат следовало ожидать, так как число узлов $P_{lm}(x)$, как известно, равно $l - |m|$.

Из (3.25) находим

$$\frac{\partial}{\partial l} \int_{x_1}^{x_2} k dx = \pi.$$

Следовательно,

$$a^2 = \frac{2l+1}{\pi}.$$

Окончательно имеем

$$P_{lm}(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{1}{\sqrt{k}} \cos \left(\int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

где

$$k = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{m^2}{1-x^2}}.$$

Квазиклассическое представление сферических функций позволяет приближенно вычислять суммы вида

$$I_l(\theta) = \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \Phi(m).$$

Действительно, используя условие квантования (3.25) и заменяя суммирование интегрированием, получаем

$$\begin{aligned} I_l(\theta) &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-(l+1/2)|\sin\theta|}^{(l+1/2)|\sin\theta|} \frac{\Phi(m) dm}{(l+1/2)\sin\theta \sqrt{1 - \frac{m^2}{(l+1/2)^2 \sin^2\theta}}} = \\ &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} \Phi[t(l+1/2)\sin\theta]. \end{aligned}$$

В частности, для $\Phi(m) = 1$, m^2 , m^4 находим

$$\begin{aligned} \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} = \frac{2l+1}{4\pi}, \\ \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 m^2 &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} t^2 (l+1/2)^2 \sin^2\theta = \\ &= \frac{(l+1/2)^3}{4\pi} \sin^2\theta \end{aligned}$$

и

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 m^4 = \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} t^4 (l+1/2)^4 \sin^4 \theta =$$

$$= \frac{3(l+1/2)^5}{16\pi} \sin^4 \theta,$$

кроме того

$$\int_{-1}^1 P_{lm}^2 x^2 dx = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{m^2}{(l+1/2)^2} \right).$$

Рекомендуем читателю с помощью этих формул вычислить уровни деформированного ядра (см. 2.2).

Распределение Томаса — Ферми в атоме. Для потенциальной энергии V электрона можно написать следующее электростатическое уравнение:

$$\Delta V = -4\pi\rho, \quad (3.26)$$

где ρ — плотность электронов в данной точке. Это уравнение — приближенное, так как на самом деле имеем многочастичную задачу — ядро и Z электронов, и потенциал

$$V(r, r_i) = -\frac{Z}{r} + \sum_{i=1}^Z \frac{1}{|r - r_i|}$$

есть оператор, а не число, т. е. V зависит от электронных координат, в то время как ρ , очевидно, нет. Следовательно, потенциал в (3.26) есть значение истинного потенциала, усредненное по движению электронов.

Поскольку частиц много, то отклонения $V(r, r_i)$ от $V_1(r)$ будут в среднем малы (хотя формально $V(r, r_i)$ может принимать любые значения). Уравнение Шредингера с таким усредненным потенциалом имеет вид

$$\Delta\Psi + 2(E - V)\Psi = 0, \quad (3.27)$$

причем потенциал V можно считать сферически-симметричным (сферическая симметрия может нарушаться лишь за счет наружных электронов или незаполненных оболочек).

Тогда $\Psi_{nlm} = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}$.

Плотность электронов равна

$$\rho = 2 \sum_{nlm} |\Psi_{nlm}|^2 = 2 \sum_{nlm} \frac{u_{nl}^2}{r^2} |Y_{lm}|^2. \quad (3.28)$$

Суммирование по m с учетом соотношения

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}$$

приводит к выражению

$$\rho(r) = 2 \sum \frac{u_{nl}^2(r)}{r^2} \frac{2l+1}{4\pi}. \quad (3.29)$$

В квазиклассическом приближении радиальная волновая функция имеет вид

$$u_{nl}(r) = \frac{a_{nl}}{\sqrt{k_{nl}}} \cos \left(\int_{r_1}^r k_{nl} dr - \frac{\pi}{4} \right), \quad (3.30)$$

где

$$k_{nl}^2(r) = 2(E_{nl} - V(r) - \frac{(l+1/2)^2}{2r^2}), \quad a_{nl}^2 \approx \frac{2}{\pi} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n}.$$

Уровни энергии E_{nl} находятся из правила квантования Бора

$$\int_{r_1}^{r_2} k_{nl} dr = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (3.31)$$

При $l = 0$ вместо $n + 1/2$ в отношении (3.31) нужно написать n (см. стр. 155).

Из (3.29) и (3.30) получаем

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi} \sum_{nl} \frac{a_{nl}^2}{k_{nl} r^2} (2l+1) \cos^2 \left(\int_{r_1}^r k_{nl} dr - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.32)$$

В квазиклассическом приближении можно заменить среднее значение квадрата косинуса на $1/2$.

Из (3.32) имеем

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{nl} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \frac{2l+1}{r^2} \frac{1}{k_{nl}}. \quad (3.33)$$

От суммирования по n в (3.33) перейдем к интегрированию

при фиксированном l ; так как

$$\sum_n \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} (\dots) \rightarrow \int \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} dn (\dots) \rightarrow \int dE (\dots),$$

то

$$\sum_n \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \frac{1}{k_{nl}} = \int \frac{dE}{k_{nl}} = \int \frac{dE}{\sqrt{2(E - V_l)}} = \sqrt{2(E - V_l)} \Big|_{E_{\min}}^0,$$

где $E_{\min} = V_l$ (при $E > V_l$ волновая функция имеет вид $\cos\left(\int k dr - \frac{\pi}{4}\right)$, а при $E < V_l$ она затухает экспоненциально и вкладом этой части в $\rho(r)$ можно пренебречь). Поэтому выражение (3.33) можно записать в виде

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_l \frac{2l+1}{r^2} \sqrt{2(E - V_l)}. \quad (3.34)$$

Так как $V_l = V + \frac{1}{2r^2} \left(l + \frac{1}{2}\right)^2$, то $2 \frac{dV_l}{dl} = \frac{2l+1}{r^2}$, так что (3.34) принимает вид

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \frac{1}{\pi^2} \sum_l \frac{dV_l}{dl} \sqrt{2(E - V_l)} = \frac{1}{\pi^2} \int \sqrt{2(E - V_l)} dV_l = \\ &= -\frac{2}{3 \cdot 2\pi^2} (-2V_l)^{3/2} \Big|_{V_{l\min}}^{V_{l\max}}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

$V_{l\min}$ соответствует $l = 0$, $V_{l\min} = V$. Величина $V_{l\max}(r) = 0$. Для состояний с большими l точка r находится в классически недоступной области, и такие состояния вносят экспоненциально малый вклад в плотность в точке r (рис. 33).

Итак,

$$\rho(r) = \frac{1}{3\pi^2} (-2V)^{3/2}. \quad (3.36)$$

Обозначая $-V \equiv \varphi$, запишем уравнение Пуассона (3.26) с учетом (3.36) в следующем виде:

$$\Delta\varphi = 4\pi\rho = \frac{8}{3\pi} \sqrt{2} \varphi^{3/2} = C\varphi^{3/2}, \quad (3.37)$$

где $C \equiv 8\sqrt{2}/3\pi$. Это — так называемое уравнение То-маса — Ферми.

Если $r \rightarrow 0$, то $\varphi \rightarrow Z/r$ — потенциал ядра. Целесообразно заменить $\varphi(r) = Z\chi(r)/r$ с граничным условием $\chi(0) = 1$. В сферических координатах

$$\Delta\varphi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\varphi) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(Z\chi), \quad (3.38)$$

следовательно, из (3.37) имеем

$$\chi''(r) = C \frac{Z^{1/2}}{r^{3/2}} \chi^{3/2}. \quad (3.39)$$

Введем новую переменную $x = \alpha Z^{1/3} r$ (α выберем позже) с целью получить универсальное уравнение для функции χ .

Тогда из (3.39) находим

$$\alpha^2 Z^{2/3} \chi'' = CZ^{1/2} \frac{1}{x^{1/2}} \alpha^{1/2} Z^{1/6} \chi^{3/2},$$

или, если выбрать $\alpha^{3/2} = C$, т. е. $\alpha = \left(\frac{8\sqrt{2}}{3\pi}\right)^{2/3}$, то окончательно находим

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\chi}{dx^2} &= \frac{1}{\sqrt{x}} \chi^{3/2}, \\ \chi(\infty) &= 0, \quad \chi(0) = 1. \end{aligned} \right\} \quad (3.40)$$

Уравнение (3.40) решается численно (в 1.1 дано приближенное его решение). Решение его определяет распределение плотности электронов. Характерный радиус этого распределения в безразмерных единицах $x \sim 1$, следовательно, в обычных единицах $a_{\text{Т-Ф.}} \sim a_0 / \sqrt[3]{Z}$. На этом расстоянии находится большинство электронов. Полученный результат совпадает с приближенной оценкой, приведенной на стр. 37.

Уравнение (3.40) справедливо в той области атома, где применимо квазиклассическое приближение.

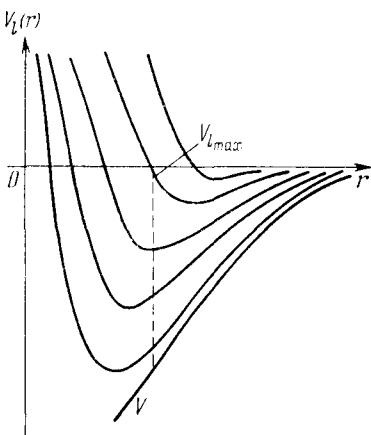


Рис. 33.

ЗАДАЧА

В каком интервале r применимо распределение Томаса — Ферми?

О т в е т. $r_{\min} \sim 1/Z$, $r_{\max} \sim 1$.

Оценки ядерных матричных элементов. В теории ядра часто приходится вычислять различные суммы матричных элементов. Рассмотрим, какие матричные элементы вносят наибольший вклад в такие суммы.

Пусть $U(r)$ — величина, заметно изменяющаяся на расстояниях порядка радиуса ядра. Оценим квазиклассически матричный элемент $U_{\lambda_1\lambda_2} = (\varphi_{\lambda_1} U \varphi_{\lambda_2})$, где φ_{λ} — волновая функция нуклона в самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными нуклонами ядра, λ — совокупность квантовых чисел, описывающих состояние нуклона.

Рассмотрим сначала сферическое ядро. Тогда $\lambda \equiv n, j, l, m$, где n — радиальное, l — орбитальное и m — магнитное квантовые числа, $j = l \pm 1/2$. Покажем, что соседние уровни в сферическом ядре не комбинируют между собой, т. е. дают малое значение матричного элемента $U_{\lambda_1\lambda_2}$. Предварительно оценим расстояние между соседними уровнями. В деформированном ядре уровни с различными проекциями момента на ось симметрии расщеплены, поэтому если A — число нуклонов в ядре, а ε_F — энергия Ферми, т. е. энергетическое расстояние от дна самосогласованной ямы до места заполнения последних нуклонов, то среднее расстояние между одночастичными уровнями имеет порядок ε_F/A . Величина ε_F не зависит от A с той же точностью, с какой постоянна плотность n ядерного вещества. Действительно, в системе, которая удерживается силами, действующими между ее частицами, радиус действия сил и среднее расстояние между частицами имеют одинаковый порядок величины. Поэтому все величины, характеризующие ядро, можно выразить с помощью размерных оценок друг через друга. В частности, $\varepsilon_F \sim n^{2/3}$ ($M = \hbar = 1$).

В сферическом ядре существует вырождение по проекции углового момента с кратностью порядка величины углового момента $l \sim p_F R$, где R — радиус ядра, а p_F — импульс нуклона на границе Ферми. Так как $R = r_0 A^{1/3}$, где r_0 — величина порядка среднего расстояния между

нуклонами, то $p_F R = p_F r_0 A^{1/3} \sim A^{1/3}$. Следовательно, среднее расстояние между ближайшими уровнями сферического ядра имеет порядок величины $\varepsilon_F / A^{2/3}$.

Оценим сначала расстояние между уровнями, отличающимися лишь радиальными квантовыми числами n , причем $\delta n \sim 1$. Для этого продифференцируем по n условие квантования Бора $\int p_r dr \sim n$, где p_r — радиальный импульс. Получаем

$$1 \sim \int \frac{\partial p_r}{\partial n} dr = \int \frac{\partial p_r}{\partial \varepsilon_{nl}} \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} dr \sim \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \int \frac{dr}{v} \sim \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \frac{R}{v},$$

где ε_{nl} — уровень энергии, а $v = \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial p_r}$ — скорость нуклона.

Отсюда

$$\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \sim \frac{n}{R} = \frac{v}{r_0 A^{1/3}} \sim \frac{p_F v}{A^{1/3}} \sim \frac{\varepsilon_F}{A^{1/3}}.$$

Оценим теперь расстояние между уровнями, отличающимися лишь орбитальными квантовыми числами l , причем $\delta l \sim 1$. Для этого продифференцируем по l соотношение $\int p_r dr \sim n$, учитывая, что $p_r = \sqrt{2 \left[\varepsilon_{nl} - V(r) - \frac{(l + 1/2)^2}{2r^2} \right]}$. Здесь $V(r)$ — потенциальная энергия нуклона. Получаем:

$$\int \frac{dr}{p_r} \left(\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} - \frac{l}{r^2} \right) = 0,$$

т. е.

$$\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{p_r} \sim l \int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{r^2 p_r},$$

где $r_{\min}$ находится из условия $p_r = 0$, т. е. $r_{\min} \sim l/p_F$.

В интеграле $\int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{p_r}$ существенна вся область интегрирования, поэтому мы его оцениваем как R/v . В интеграле же $\int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{r^2 p_r}$ основной вклад вносится областью

вблизи $r_{\min}$, поэтому его оценка $1/r_{\min} p_F \sim 1/l$. Итак,

$$\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \frac{R}{v} \sim l \frac{1}{l} = 1, \text{ т. е. } \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \sim \varepsilon_F / A^{1/3}.$$

Таким образом, мы получили, что

$$\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \sim \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \sim \varepsilon_F A^{-1/3}.$$

Поэтому уровень сферического ядра, ближайший к данному (т. е. отстоящий от него на расстояние $\varepsilon_F / A^{2/3}$), получается, как правило, за счет больших изменений δn и δl , так чтобы величина

$$\delta \varepsilon_{nl} = \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \delta n + \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \delta l$$

была минимальна.

Для этого нужно выбрать $\delta n, \delta l \sim A^{1/3}$. Следовательно, ближайшие уровни сферического ядра, как правило, сильно отличаются по числу узлов радиальной и угловой частей волновой функции, а потому дают малое значение матричного элемента $U_{\lambda_1 \lambda_2}$.

Состояния с энергиями $|\varepsilon_{\lambda_1} - \varepsilon_{\lambda_2}| \gg \varepsilon_F / A^{1/3}$ также дают малое значение $U_{\lambda_1 \lambda_2}$, так как функции φ_{λ_1} и φ_{λ_2} сильно различаются по числу узлов.

Итак, матричный элемент $U_{\lambda_1 \lambda_2}$ заметно отличен от нуля для $\lambda_1 = \lambda_2$ (если он при этом не равен строго нулю из-за правил отбора) и для $|\varepsilon_{\lambda_1} - \varepsilon_{\lambda_2}| \sim \varepsilon_F A^{-1/3}$, когда числа узлов функций φ_{λ_1} и φ_{λ_2} мало различаются.

Все сказанное выше о комбинирующих уровнях остается в силе и для деформированного ядра, если оператор U меняет квантовые числа n и l . Если же U меняет лишь магнитное квантовое число m (например, оператор углового момента), то комбинируют уровни с соседними m , принадлежащие одному мультиплету nl . Оценим расстояние между ними. Выше (см. стр. 84) было показано, что в первом порядке теории возмущений расщепление уровней определяется соотношением

$$\varepsilon_{nlm} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{nl} \beta \left(\frac{m^2}{l^2} - \frac{1}{3} \right),$$

где β — величина деформации. Следовательно,

$$\frac{\partial \varepsilon_{nlm}}{\partial m} \sim \varepsilon_{nl} \beta \frac{m}{l^2} \sim \varepsilon_F \beta A^{-1/3},$$

т. е. в этом случае могут комбинировать и близкие уровни (при малых β).

Нецентральный потенциал. Рассмотрим более общий случай, когда переменные не разделяются, и построим в этом случае квазиклассическое решение. Ищем решение уравнения

$$\Delta \Psi + k^2 \Psi = 0$$

в виде $\Psi = A e^{iS}$. Тогда

$$\Delta A + 2i \nabla A \nabla S - A (\nabla S)^2 + i A \Delta S + k^2 A = 0. \quad (3.41)$$

Отделяя действительную и мнимую части, из (3.41) получаем два уравнения

$$\Delta A + k^2 A = A (\nabla S)^2, \quad (3.42)$$

$$2 \nabla A \nabla S + A \Delta S = 0. \quad (3.43)$$

Уравнение (3.43) означает закон сохранения частиц. Действительно,

$$\begin{aligned} j &= \frac{1}{2i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \\ &= \frac{1}{2i} [A e^{-iS} \nabla (A e^{iS}) - A e^{iS} \nabla (A e^{-iS})] = A^2 \nabla S \end{aligned}$$

и

$$\operatorname{div} j = \nabla (A^2 \nabla S) = A^2 \Delta S + 2 \nabla A \nabla S \cdot A = 0.$$

Следовательно, вдоль линии тока

$$j_1 d\sigma_1 = j_2 d\sigma_2, \quad (3.44)$$

где $d\sigma_1$ и $d\sigma_2$ — нормальные элементы площади трубки тока (рис. 34).

Если $\Delta A/A \ll k^2$, то из (3.42) следует уравнение Гамильтона — Якоби для действия S :

$$2 [E - V(r)] = (\nabla S)^2. \quad (3.45)$$

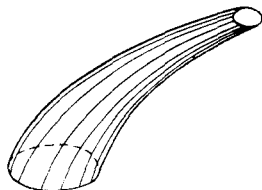


Рис. 34.

Квазиклассическая задача рассеяния. Построим квазиклассическую волновую функцию для задачи рассея-

ния. Предварительно заметим, что уравнение (3.45) содержит не одно решение: в любую точку в $+\infty$, куда устремляются частицы после рассеяния, частица может прийти по меньшей мере двумя путями. Это изображено на рис. 35. Здесь 1 и 2 — две точки фронта плоской падающей волны.

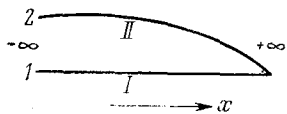


Рис. 35.

Поэтому на основе принципа суперпозиции вместо решения $\Psi = Ae^{iS}$ мы должны потребовать $\Psi = \sum_i A_i e^{iS_i}$,

где сумма берется по всем классическим траекториям, соединяющим рассматриваемые точки.

Предположим для простоты, что есть только две траектории, соединяющие фронты падающей и рассеянной волн на бесконечности. Вдоль траектории I, которая проходит вдали от центра рассеяния, трубка тока параллельна оси x ; A и ∇S постоянны, причем $\nabla S = p_0$. Можно положить, что значение Ψ -функции в каждой точке фронта падающей волны равно 1. Поэтому $A_1 = A_2 = 1$. Следовательно,

$$\Psi_1 = \exp \left[i \int_{-L}^x p_0 dx \right] = \exp (ip_0 x + ip_0 L),$$

где L — пока произвольное число. Найдём второе решение Ψ_2 . Вдоль второй трубки тока $A^2 \nabla S d\sigma = \text{const}$. На $-\infty$ имеем $A_2 = 1$, $\nabla S = p_0$, $d\sigma = \rho d\rho d\varphi$, где ρ — прицельный параметр. Следовательно,

$$p_0 \rho d\rho d\varphi = A_2^2 p_0 r^2 d\Omega. \quad (3.46)$$

Тогда

$$\Psi_2 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_2 e^{iS_2} = \sqrt{\frac{\rho d\rho d\varphi}{r^2 d\Omega}} \exp \left[i \int_{-L}^r p dl \right],$$

а полное решение задачи имеет вид

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp (ip_0 x + ip_0 L) + \sqrt{\frac{\rho d\rho d\varphi}{r^2 d\Omega}} \exp \left[i \int_{-L}^r p dl \right]. \quad (3.47)$$

Умножим правую часть этого равенства на постоянный

множитель $e^{-ip_0 L}$:

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 x} + \sqrt{\frac{\rho}{r^2} \frac{d\rho}{d\Omega}} \exp i \left[p_0 r + \int_{-L}^r p dl - \int_{-L}^r p_0 dl_0 \right],$$

или

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 x} + \frac{f}{r} e^{ip_0 r},$$

где

$$f = \sqrt{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{кл}}} e^{i\Phi}, \quad (3.48)$$

$$\Phi \equiv \int_{-\infty}^{\infty} p dl - \int_{-\infty}^{\infty} p_0 dl_0. \quad (3.49)$$

Траектории l и l_0 изображены на рис. 36.

В выражении (3.49) существенный вклад вносят точки вблизи центра рассеяния. Выражение (3.49) требует уточнения в том случае, когда классическая траектория проходит вблизи точек, где квазиклассика неприменима. Совокупность таких точек образует поверхность, называемую *каустикой*. Каустика отделяет область, доступную для классического движения, от недоступной. Например, для кулоновского потенциала отталкивания каустика имеет вид параболоида вращения, а в случае притяжения она представляет собой прямую линию, идущую от центра рассеяния к $+\infty$.

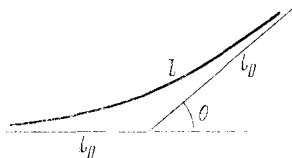


Рис. 36.

Найдем, как меняется фаза волновой функции вблизи касания траектории с каустикой. Разложим движение частицы на два движения: перпендикулярно касательной к каустике и вдоль касательной. Движение в перпендикулярном направлении аналогично квазиклассическому отражению от точки поворота в одномерной задаче. При этом разность фаз падающей и отраженной волн, как мы видели, равна $\pi/4 - (-\pi/4) = \pi/2$. При движении вдоль касательной к каустике изменения фазы не происходит. Следовательно, вместо (3.49) для Φ

получается следующее выражение:

$$\Phi = \int_{-\infty}^{\infty} p \, dl - \int_{-\infty}^{\infty} p_0 \, dl_0 + i\nu \frac{\pi}{2},$$

где ν — число точек касания с каустикой. В случае кулоновского потенциала $\nu = 1$.

Сечение рассеяния протона на атоме водорода. При рассмотрении задачи о перезарядке (см. стр. 113) было получено, что амплитуда рассеяния $f_1 = 1/2 (f_s + f_a)$, а амплитуда перезарядки $f_2 = 1/2 (f_s - f_a)$, где f_s , f_a — амплитуды соответственно симметричного и антисимметричного рассеяния.

Потенциал V_s мало отличается от V_a , поэтому классическое сечение можно считать одинаковым для V_s и V_a , между тем как фазы Φ_s и Φ_a могут сильно различаться. Действительно, Φ_s , Φ_a — очень большие числа, поэтому и $\Phi_s - \Phi_a$ может быть велико.

Следовательно, согласно (3.48)

$$f_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}}} (e^{i\Phi_s} + e^{i\Phi_a}), f_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}}} (e^{i\Phi_s} - e^{i\Phi_a}).$$

Сечение перезарядки равно

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{перез}} &= |f_2|^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} |e^{i\Phi_s} - e^{i\Phi_a}|^2 = \\ &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \sin^2 \frac{1}{2} (\Phi_s - \Phi_a). \end{aligned}$$

Так как

$$\Phi \equiv \int_{-\infty}^{\infty} p \, dl - \int_{-\infty}^{\infty} p_0 \, dl_0,$$

то

$$\begin{aligned} \Phi_s - \Phi_a &= \int_{-\infty}^{\infty} (p_s - p_a) \, dl \approx \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m_p (V_s - V_a)}{p} \, dl \approx \frac{1}{v_0} \int_{-\infty}^{\infty} (V_s - V_a) \, dl, \end{aligned}$$

где m_p — масса, а v_0 — скорость протона.

Рассмотрим рассеяние на малые углы. Обозначим $V_s - V_a \equiv V$. Тогда для сечения перезарядки получаем следующее выражение:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{перез}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \sin^2 \left[\frac{1}{2v_0} \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{\rho^2 + x^2}) dx \right]. \quad (3.50)$$

Здесь ρ — прицельный параметр. Это выражение совпадает с сечением, полученным в (2.4). Для сечения рассеяния получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{расс}} &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \cdot \cos^2 \left[\frac{1}{2v_0} \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{\rho^2 + x^2}) dx \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} - \frac{1}{2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \cdot \cos \left[\frac{1}{v_0} \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{\rho^2 + x^2}) dx \right]. \end{aligned}$$

Таким образом, наряду с обычным классическим рассеянием получаются квантовомеханические осцилляции сечения рассеяния как функции угла отклонения.

АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФИЗИЧЕСКИХ
ВЕЛИЧИН

В последние десятилетия развитие экспериментальной и теоретической физики сильно взаимодействующих элементарных частиц (адронов) потребовало создания теоретических методов, не предполагающих малость взаимодействия и, следовательно, не использующих теорию возмущений. Одним из таких методов является использование аналитических свойств физических величин, например, использование аналитических свойств амплитуды рассеяния как функции энергии или угла отклонения.

В тех случаях, когда изучаемая величина имеет особенность в комплексной плоскости вблизи вещественной оси, ее поведение на вещественной оси определяется характером этой особенности. Одним из первых примеров такого рода была теория реакций с образованием медленных частиц (см. ниже). В этом случае полюс в амплитуде рассеяния друг на друге родившихся в результате реакции частиц определяет энергетический ход процесса. Существование в системе взаимодействующих частиц уровней с малыми энергиями, как мы увидим, настолько упрощает энергетическую и координатную зависимость волновых функций при малых энергиях, что позволяет свести задачу нахождения энергетического спектра к простому алгебраическому уравнению.

Аналитические свойства позволяют установить соотношение между мнимой частью амплитуды рассеяния, которая определяется поглощением частиц, и ее вещественной частью (дисперсионное соотношение). Из таких соотношений вытекает большое число экспериментально наблюдаемых следствий в различных областях физики.

Все физические величины при реальных значениях параметров не должны обращаться в бесконечность. Иными словами, на вещественной оси в реально достижимых областях физические функции конечны, так как все величины, получаемые в результате измерений, пред-

ставляют собой гладкие функции параметров. Особые точки физических величин на вещественной оси возникают в результате разумной идеализации рассматриваемой системы.

Поясним сказанное на примере. Как известно, сечение рассеяния частицы на экранированном кулоновском потенциале $\frac{e}{r} e^{-ar}$ в борновском приближении пропорционально $(q^2 + a^2)^{-2}$. Здесь q — передаваемый импульс. В комплексной плоскости передаваемого импульса сечение имеет особую точку. Если рассматривать более идеализированную систему — без экранирования, то $a \rightarrow 0$ и особенность переходит на вещественную ось q .

Предположим теперь, что изучается рассеяние на неэкранированном заряде. Тогда в идеализированном выражении амплитуды рассеяния имеется особая точка при $q = 0$. В этом случае бесконечность сечения устраняется конечной шириной d пучка налетающих частиц. Действительно, ограничение пучка приводит к неопределенности поперечного импульса частиц $\Delta p_{\perp} \sim 1/d$ и тем самым к невозможности выделения малых углов отклонения, соответствующих $q \rightarrow 0$. Однако улучшение эксперимента (увеличение d) позволит как угодно приблизиться к особой точке $q = 0$, что и означает разумность рассматриваемой идеализации.

Другой пример — это пороговые особенности. Они возникают из статистического веса конечных состояний (см. ниже, стр. 203). Например, сечение выбивания нуклона из ядра вблизи порога пропорционально $\sqrt{E - E_0}$, где E — энергия налетающей частицы, E_0 — энергия порога. Такая зависимость возникла из-за статистического веса конечных состояний

$$f_0(E - E_0) =$$

$$\begin{aligned} = \int \delta(E_p - E) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} &\sim \int_{E_0}^{\infty} \delta(E_p - E) \sqrt{E_p - E_0} dE_p = \\ &= \sqrt{E - E_0}. \end{aligned}$$

В реальной постановке эксперимента энергия налетающей частицы не фиксирована, а распределена, скажем, по гауссовому закону около энергии E . Поэтому в

сечение рождения входит не величина f_0 , а

$$\begin{aligned} f(E - E_0) &= \sqrt{\pi\alpha} \int_{E_0}^{\infty} e^{-\alpha(E-E_0)^2} \sqrt{E_1 - E_0} dE_1 = \\ &= \sqrt{\pi\alpha} \int_0^{\infty} e^{-\alpha(E-E_0-x)^2} \sqrt{x} dx. \end{aligned}$$

Сечение рождения пропорционально этой величине. Вычисляя интеграл, находим:

$$f(\varepsilon) = \frac{\pi}{2\sqrt{\alpha}} (2\alpha)^{-1/4} e^{-\alpha\varepsilon^2/2} \mathcal{D}_{-3/2}(-\varepsilon\sqrt{2\alpha}).$$

Здесь $\mathcal{D}$ — функция параболического цилиндра, а $\varepsilon = E - E_0$. Функция $f(\varepsilon)$ не имеет особенностей в точке порога $\varepsilon = 0$.

Используя асимптотику $\mathcal{D}$ -функции, получаем, что при $\varepsilon \rightarrow -\infty$, $f(\varepsilon) \sim e^{-\alpha\varepsilon^2}$, а при $\varepsilon \rightarrow +\infty$, $f(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$.

На рис. 37 показан график $f(\varepsilon)$.

Когда энергия налетающей частицы фиксируется все более и более точно ($\alpha \rightarrow \infty$), кривая $f(\varepsilon)$ стремится к предельной кривой (она изображена пунктиром на рис. 37), кото-

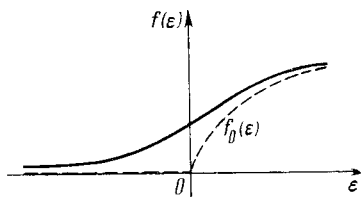


Рис. 37.

рая имеет особенность при $\varepsilon = 0$. Таким образом, корневая особенность при $\varepsilon = 0$ появляется в результате идеализации реальной задачи рассеяния.

В комплексной плоскости параметров физические функции могут иметь различные особые точки. В каждом случае для их появления должны быть физические причины.

Из свойств аналитичности можно делать важные заключения о связях между различными физическими величинами. Сначала мы рассмотрим несколько простых физических примеров, а затем найдем решение ряда задач, которые не могут быть изучены без использования аналитических свойств.

Зависимость момента инерции ядра от деформации. Для квантовомеханической сферической системы момент инерции следует считать равным нулю.

Действительно, для того чтобы наблюдать вращение, необходимо иметь отметку на поверхности системы. Такая отметка соответствует возбужденному состоянию, при котором система перестает быть сферической.

По мере уменьшения деформации энергия вращательных термов увеличивается до бесконечности, что и соответствует стремлению к нулю момента инерции. Для пояснения получим квантовомеханическое выражение для момента инерции.

Перейдем в систему координат, вращающуюся с угловой скоростью Ω . При этом в гамильтониане возникает дополнительное слагаемое

$$H' = -M\Omega,$$

где M — оператор углового момента системы.

Рассматривая H' как малое возмущение, легко получить выражение для среднего значения углового момента

$$\langle M \rangle = 2 \sum \frac{|M_{0S}|^2}{E_S - E_0} \Omega \equiv J\Omega.$$

Мы определили момент инерции как отношение $\langle M \rangle / \Omega$.

Если при рассматриваемых угловых скоростях можно пренебречь возбуждениями внутренних степеней свободы системы, то вращательная энергия будет

$$E = \frac{M^2}{2J} = \frac{i(i+1)}{2J}$$

с тем же моментом инерции J :

$$J = 2 \sum \frac{|M_{0S}|^2}{E_S - E_0}.$$

Из этого выражения следует, что для сферической системы, когда M имеет только диагональные матричные элементы, $J = 0$.

Рассмотрим момент инерции J при малых деформациях δ . С какого члена начинается разложение J по степеням δ ? Легко убедиться в том, что выражение $J = A\delta$ неправильно. Предположим, что $J = A\delta$ для положи-

тельных δ («огурец»). Так как J — всегда положительная величина, то для отрицательных δ («блин») $J = A |\delta| = A \sqrt{\delta^2}$. Следовательно, момент инерции как функция δ^2 имел бы в нуле точку ветвления. Между тем, можно убедиться в том, что нет никаких причин для появления особой точки. Действительно, перейдем от слабо деформированного ядра к сферическому с помощью соответствующего преобразования координат. В гамильтониане появится малая добавка H' , пропорциональная величине деформации δ . Для конечной системы применение теории возмущений дает сходящийся ряд. Следовательно, момент инерции не имеет особой точки при $\delta = 0$. Поэтому момент инерции можно разлагать по степеням δ , и это разложение начинается с квадратичного члена $J = B\delta^2 + \dots$

Зависимость частоты звука от волнового вектора. Как известно, при малых волновых числах k (т. е. больших длинах волн $\lambda = 1/k$) в некоторых системах могут распространяться звуковые возбуждения с частотой $\omega = ck$. Здесь c — скорость звука. Так как ω — скаляр, а k — вектор, то это соотношение означает $\omega = c \sqrt{k^2}$. Итак, при $k = 0$ частота ω как функция k^2 имеет точку ветвления. Объясним, почему здесь возникает особая точка.

Уравнения, описывающие состояние системы, не меняются при замене $t \rightarrow -t$, если нет поглощения. Поэтому в отсутствие поглощения уравнение для определения частоты всегда содержит четные степени ω . Например, в классической механике уравнения Ньютона для системы частиц при малых колебаниях имеют вид

$$m\ddot{u}_n = - \sum_m F_{mn} u_m.$$

Здесь m — масса n -й частицы, u_n — ее смещение, а F_{mn} — сила, действующая на n -ю частицу со стороны m -й. Полагая $u_n = u_{0n} e^{i\omega t}$, получим дисперсионное уравнение для квадрата частоты звука ω^2 в виде

$$m\omega^2 u_{0n} = \sum_m F_{mn} u_{0m}.$$

Следовательно, квадрат частоты звука ω^2 , а не сама частота ω , должен быть аналитической функцией параметров

задачи. Поэтому

$$\omega^2 = a + c^2 k^2 + b k^4 + \dots$$

Деформация среды, соответствующая звуковой волне при $k \rightarrow 0$, должна переходить в сдвиг системы как целого. Энергия, соответствующая такому сдвигу, равна нулю. Поэтому для звуковых волн $a = 0$ (теорема Гольдстоуна), и следовательно, для малых k частота $\omega = c |k|$.

1. АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОСТОЯННОЙ

Как мы увидим, аналитичность некоторых физических величин определяется требованиями причинности. Рассмотрим, например, аналитические свойства диэлектрической постоянной. Электрическая индукция $\mathcal{D}(t)$, возникающая в системе при наложении электрического поля $\mathcal{E}$, определяется амплитудой поля во все предыдущие моменты времени $t - \tau$ ($\tau > 0$). Итак,

$$\mathcal{D}(t) = \int_0^{\infty} \mathcal{K}(\tau) \mathcal{E}(t - \tau) d\tau; \quad (4.1)$$

$\mathcal{K}(\tau)$ — вещественная и убывающая функция τ , так как она связывает физические величины, сдвинутые по времени на величину τ . Это соотношение вытекает лишь из того, что следствие наступает позже причины.

Разложим $\mathcal{E}$ и $\mathcal{D}$ в ряды Фурье

$$\mathcal{E} = \int \mathcal{E}_{\omega} e^{-i\omega t} d\omega, \quad \mathcal{D} = \int \mathcal{D}_{\omega} e^{-i\omega t} d\omega.$$

Из (4.1) находим

$$\mathcal{D}_{\omega} = \mathcal{E}_{\omega} \int_0^{\infty} \mathcal{K}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau,$$

откуда диэлектрическая постоянная определяется соотношением

$$\varepsilon_{\omega} = \frac{\mathcal{D}_{\omega}}{\mathcal{E}_{\omega}} = \int_0^{\infty} \mathcal{K}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (4.2)$$

Величина ε_ω аналитична в верхней полуплоскости ω . Действительно, если обозначить $\omega = \omega_0 + i\omega_1$, где $\omega_1 > 0$, то подинтегральное выражение в (4.2) содержит затухающую экспоненту $e^{-\omega_1 \tau}$, и поэтому интеграл (4.2) сходится и, следовательно, представляет собой аналитическую функцию.

Нетрудно видеть, что аналитические свойства ε и $1/\varepsilon$ совпадают. Рассмотрим длинный и короткий цилиндры

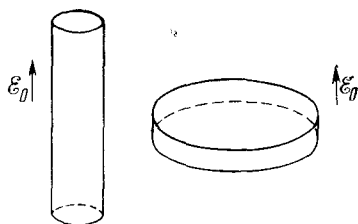


Рис. 38.

вещества, на которые наложено внешнее поле $\mathcal{E}_0$ (рис. 38). В случае длинного цилиндра поле внутри $\mathcal{E}$ равняется внешнему полю $\mathcal{E}_0$, а индукция $\mathcal{D} = \varepsilon \mathcal{E}_0$. В случае короткого цилиндра индукция $\mathcal{D}$ равняется внешнему полю $\mathcal{E}_0$, а поле внутри $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0/\varepsilon$. Это вытекает из известных граничных условий для нормальных и тангенциальных составляющих электрического поля и индукции.

В первом случае имеем

$$\mathcal{D} = \int_0^\infty \mathcal{K}_1(\tau) \mathcal{E}_0(t - \tau) d\tau, \quad \varepsilon = \int_0^\infty \mathcal{K}_1(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau.$$

Во втором случае поле $\mathcal{E}$ определяется значениями $\mathcal{E}_0 = \mathcal{D}$ в предыдущие моменты времени,

$$\mathcal{E} = \int_0^\infty \mathcal{K}_2(\tau) \mathcal{D}(t - \tau) d\tau,$$

откуда

$$\frac{1}{\varepsilon} = \int_0^\infty \mathcal{K}_2(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau.$$

Таким образом, аналитические свойства ε и $1/\varepsilon$ совпадают. Следовательно, диэлектрическая постоянная не имеет ни полюсов, ни нулей в верхней полуплоскости ω .

Используя аналитичность, можно выразить вещественную часть диэлектрической постоянной через ее мнимую

мую часть. Рассмотрим комплексную плоскость ω^2 . В этом случае область аналитичности представляет собой первый лист римановой поверхности — все особые точки лежат на втором листе. Первый лист переходит во второй через разрез, идущий вдоль положительных ω^2 из начала координат (рис. 39).

Для того, чтобы связать вещественную и мнимую части диэлектрической постоянной, воспользуемся теоремой Коши:

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z') dz'}{z' - z}.$$

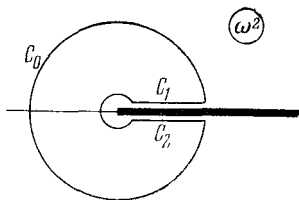


Рис. 39.

Здесь C — замкнутый контур, не содержащий внутри себя особых точек $f(z)$. Применим эту теорему к функции $\varepsilon(\omega^2)$, взяв в качестве C контур, изображенный на рис. 39. Целесообразно выбрать функцию f так, чтобы интеграл по бесконечно большому кругу C_0 обращался в нуль. Так как при $\omega \rightarrow \infty$ величина $\varepsilon \rightarrow 1$ (как мы увидим ниже), то нужно взять $f = \varepsilon - 1$. Итак,

$$\varepsilon(\omega^2) - 1 = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1+C_2} \frac{\varepsilon(\omega_1^2) - 1}{\omega_1^2 - \omega^2} d\omega_1^2. \quad (4.3)$$

Здесь интегрирование сводится к обходу разреза. Обозначим через $\varepsilon_1(\omega^2)$ значение ε на верхнем берегу разреза, а $\varepsilon_2(\omega^2)$ — значение на нижнем берегу. Свяжем эти величины друг с другом. Положим на верхнем берегу разреза $\omega = \omega_0$ (ω_0 вещественно). Тогда на нижнем берегу имеем $\omega = \omega_0 e^{\pi i} = -\omega_0$. Следовательно,

$$\varepsilon_1(\omega_0^2) = \int_0^\infty \mathcal{K}(\tau) e^{i\omega_0 \tau} d\tau$$

и

$$\varepsilon_2(\omega_0^2) = \int_0^\infty \mathcal{K}(\tau) e^{-i\omega_0 \tau} d\tau.$$

Так как $\mathcal{K}(\tau)$ и ω_0 вещественны, то отсюда находим, что

$$\varepsilon_2(\omega_0^2) = [\varepsilon_1(\omega_0^2)]^*. \quad (4.4)$$

Подставляя (4.4) в (4.3) и учитывая, что на верхнем берегу разреза $\omega^2 \rightarrow \omega^2 + i\delta$ ($\delta \rightarrow +0$), получаем

$$\varepsilon_\omega = \varepsilon_1(\omega^2) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{Im } \varepsilon(\omega_1^2) d\omega_1^2}{\omega_1^2 - \omega^2 - i\delta}. \quad (4.5)$$

Легко проверить, что при выбранном знаке δ вычисление мнимой части (4.5) приводит к тождеству.

Таким образом, зная мнимую часть диэлектрической постоянной, можно восстановить всю величину ε .

Мнимая часть диэлектрической постоянной, определяющая поглощение электромагнитных волн системой, отлична от нуля, только когда частота волн в пределах ширин соответствующих уровней совпадает с собственными частотами системы ω_n . Это будет ясно из рассмотренного ниже примера. Иными словами, пренебрегая ширинами, запишем $\text{Im } \varepsilon$ в виде:

$$\text{Im } \varepsilon(\omega^2) = \sum_n \pi f_n \delta(\omega^2 - \omega_n^2). \quad (4.6)$$

Подставляя (4.6) в (4.5), получаем

$$\varepsilon(\omega^2) = 1 + \sum_n \frac{f_n}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\delta}. \quad (4.7)$$

Если $\omega^2 \gg \omega_n^2$, т. е. длина волны света мала по сравнению с атомными размерами, то атомная структура становится несущественной и величина ε переходит в диэлектрическую постоянную идеального газа электронов:

$$\varepsilon = 1 - \frac{4\pi n e^2}{m \omega^2}. \quad (4.8)$$

$\omega \rightarrow \infty$

Здесь n — число электронов в единице объема, а m — масса электрона. Формула (4.8) поясняется на рассмотренном ниже примере. Сравнивая это выражение с (4.7), находим:

$$\sum_n f_n = 4\pi n e^2 / m.$$

Это соотношение называется правилом сумм.

Аналитические свойства диэлектрической постоянной в простой модели. Рассмотрим среду, состоящую из осцилляторов, имеющих частоту ω_0 (нетрудно исследовать и более

реалистический случай совокупности осцилляторов с разными частотами). Такие осцилляторы имитируют атомные электроны.

Уравнение движения для осциллятора под действием внешнего электрического поля $\mathcal{E}(t)$ имеет вид

$$\ddot{r} + h\dot{r} + \omega_0^2 r = \frac{e}{m} \mathcal{E}.$$

Здесь h —коэффициент затухания. Разлагая r и $\mathcal{E}$ в интегралы Фурье по формулам $r = \int r_\omega e^{-i\omega t} d\omega$ и $\mathcal{E} = \int \mathcal{E}_\omega e^{-i\omega t} d\omega$, получим

$$-\omega^2 r_\omega - ih\omega r_\omega + \omega_0^2 r_\omega = \frac{e}{m} \mathcal{E}_\omega,$$

откуда

$$r_\omega = \frac{e}{m} \mathcal{E}_\omega \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - ih\omega}.$$

Вычислим дипольную поляризацию вещества $\mathcal{P}_\omega$:

$$\mathcal{P}_\omega \equiv n e r_\omega = \frac{n e^2}{m} \mathcal{E}_\omega \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - ih\omega}.$$

Здесь n — число осцилляторов в единице объема. Диэлектрическая проницаемость ϵ_ω находится с помощью известных соотношений электродинамики

$$\epsilon_\omega = \frac{\mathcal{D}_\omega}{\mathcal{E}_\omega} = \frac{\mathcal{E}_\omega + 4\pi \mathcal{P}_\omega}{\mathcal{E}_\omega} = 1 + \frac{4\pi n e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - ih\omega}.$$

Отсюда при $\omega^2 \gg \omega_0^2$ получаем найденную выше формулу (4.8).

Если система состоит из осцилляторов разного типа, то в последней формуле нужно ввести сумму по частотам ω_n :

$$\epsilon_\omega = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_n \frac{n_n}{\omega_n^2 - \omega^2 - ih_n \omega}. \quad (4.9)$$

Здесь n_n — число осцилляторов с энергией ω_n в единице объема. В этом случае, полагая $\omega \rightarrow \infty$, находим

$$\epsilon_\omega \rightarrow 1 - \frac{4\pi e^2}{m\omega^2} \sum_n n_n.$$

Сравнивая с (4.8), получаем правило сумм в форме $\sum_n n_n = n$ (n — число электронов в единице объема). Мы видим, что при $\omega \rightarrow \infty$ свойства выбранной модели, как и должно быть, не влияют на результаты.

Коэффициент затухания h_n определяется интенсивностью переходов из n -го состояния в другие состояния. Мы видели (стр. 56), что $h_n \ll \omega_n$. Как видно из (4.9), коэффициент затухания определяет мнимую часть диэлектрической постоянной.

Проверим, что ϵ_ω имеет полюса и нули только в нижней полуплоскости ω . Из (4.9) следует, что полюса ϵ_ω находятся в точках $\omega = \pm \sqrt{\omega_n^2 - ih_n \omega} \approx \pm |\omega_n| - i \frac{h_n}{2}$. Так как $h_n > 0$, то $\text{Im } \omega < 0$.

Для нахождения нулей ϵ_ω рассмотрим сначала случай одного осциллятора с частотой ω_0 и коэффициентом затухания h_0 . Приравняв выражение (4.9) нулю, находим

$$\omega = \pm \sqrt{\omega_0^2 + \frac{4\pi e^2 n}{m} - ih_0 \omega} \approx \pm \sqrt{\omega_0^2 + \frac{4\pi e^2 n}{m}} - i \frac{h_0}{2}.$$

Итак, $\text{Im } \omega < 0$.

В случае нескольких осцилляторов, как видно из (4.9), вещественные части нулей будут лежать между вещественными частями полюсов. Ввиду того, что все h_n имеют одинаковый знак, они будут сдвигать нули ϵ_ω в ту же сторону, что и в случае одного осциллятора.

Таким образом, мы проверили все аналитические свойства диэлектрической постоянной на простой модели.

Исследуем в рассматриваемой модели структуру функции $\mathcal{K}(\tau)$. Имеем:

$$\epsilon_\omega = \int_0^\infty \mathcal{K}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_n \frac{n_n}{\omega_n^2 - \omega^2 - ih_n \omega}.$$

Отсюда

$$\mathcal{K}(\tau) = \delta(\tau) + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_n \frac{\sin(\sqrt{\omega_n^2 - h_n^2/4} \tau)}{\sqrt{\omega_n^2 - h_n^2/4}} e^{-h_n \tau/2}.$$

Мы видим, что величина h_n определяет затухание $\mathcal{K}(\tau)$, а также сдвиг собственных частот $\omega_n \rightarrow \sqrt{\omega_n^2 - h_n^2/4}$.

Отметим, что так как $\mathcal{K}(\tau)$ экспоненциально убывает, то индукция $\mathcal{D}(t)$ определяется значениями поля $\mathcal{E}(t - \tau)$ в момент времени, отстоящий от времени t на величину порядка $\tau \sim 1/h$. Отметим, кроме того, что мнимая часть диэлектрической постоянной есть нечетная, а вещественная — четная функция ω , в согласии с тем, что требует обратимость во времени.

2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ

Унитарность как следствие принципа суперпозиции и сохранения вероятности. Исследуем аналитические свойства амплитуды рассеяния. По определению, волновая функция Ψ_{out} после рассеяния связана с волновой функцией Ψ_{in} до рассеяния посредством так называемой S -матрицы: $\Psi_{\text{out}} = S\Psi_{\text{in}}$.

Покажем, что из сохранения вероятности и принципа суперпозиции вытекает свойство унитарности S -матрицы. Матричные элементы S -матрицы S_{ac} суть амплитуды перехода из состояния a в состояние c . Следовательно, из сохранения вероятности $\sum_c |S_{ac}|^2 = 1$. Это равенство символически записывается в виде $(S^+S)_{aa} = 1$. Из квантовомеханического принципа суперпозиции вытекает, что волновая функция $|\tilde{a}\rangle$ любого состояния может быть представлена в форме: $|\tilde{a}\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|b\rangle + \dots$, где $|a\rangle, |b\rangle \dots$ — набор базисных состояний. Условие $(S^+S)_{\tilde{a}\tilde{a}} = 1$ можно записать в виде:

$$|\alpha|^2 (S^+S)_{aa} + |\beta|^2 (S^+S)_{bb} + \dots \\ \dots + \alpha\beta^* (S^+S)_{ab} + \alpha^*\beta (S^+S)_{ba} + \dots = 1.$$

Так как $(S^+S)_{aa} = (S^+S)_{bb} = \dots = 1$ и $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + \dots = 1$, то

$$\alpha\beta^* (S^+S)_{ab} + \alpha^*\beta (S^+S)_{ba} + \dots = 0.$$

Ввиду произвольности коэффициентов α, β окончательно находим: $(S^+S)_{ab} = 0$. Вместе с условием сохранения вероятности это равенство можно записать в виде

$(S^+S)_{ab} = \delta_{ab}$ или, в операторной форме, $S^+S = 1$. Таким образом, S -матрица обладает свойством унитарности.

Удобно выделить из S -матрицы единичную матрицу, описывающую процесс без реального рассеяния: $S = 1 + iT$. Тогда условие унитарности S -матрицы приобретает вид $(1 - iT^+)(1 + iT) = 1$, или

$$T^+T = i(T^+ - T).$$

В матричных элементах это соотношение записывается в форме

$$2\text{Im } T_{ab} = \sum_c T_{ca}^* T_{cb}. \quad (4.10)$$

Определим амплитуду рассеяния f посредством соотношения $T = \frac{4\pi^2}{M} f \delta(E - E')$. Здесь M — масса рассеиваемой нерелятивистской частицы, а дельта-функция выражает закон сохранения энергии при рассеянии. Тогда соотношение (4.10) для диагональных элементов ($a = b$) можно записать в виде

$$2\text{Im } f_{aa} = \frac{4\pi^2}{M} \sum_c |f_{ac}|^2 \frac{\delta(E - E_c) \delta(E_c - E')}{\delta(E - E')}. \quad (4.11)$$

В левой части стоит амплитуда рассеяния на угол ноль. В правой части в числителе $\delta(E_c - E')$ можно заменить на $\delta(E - E')$, после чего эта δ -функция сокращается с δ -функцией в знаменателе.

Тогда в правой части уравнения (4.11) возникает сумма $\sum_c |f_{ac}|^2 \delta(E - E_c)$. Промежуточные состояния с характеризуются импульсом p' . Заменяя суммирование по p' интегрированием $\left(\sum_{p'} \rightarrow \int \frac{dp'}{(2\pi)^3}\right)$, получаем:

$$\int |f_{pp'}|^2 \delta(E_p - E_{p'}) \frac{dp'}{(2\pi)^3} = \frac{1}{8\pi^3} \int |f(\theta)|^2 d\Omega \frac{p^2}{\frac{dE}{dp}}.$$

Здесь обозначено: $f_{ab} = f_{pp'} = f(\theta)$.

Величина $\frac{dE}{dp} = v$ есть скорость падающей частицы. Интеграл $\int |f(\theta)|^2 d\Omega = \sigma$ есть полное сечение рассеяния.

Итак, из (4.11) находим:

$$2 \operatorname{Im} f(0) = \frac{4\pi^2}{8\pi^3 M} \varphi \frac{p^2}{v},$$

или

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{p}{4\pi} \sigma. \quad (4.12)$$

Это соотношение называется оптической теоремой. Оно связывает полное сечение рассеяния с мнимой частью амплитуды рассеяния на угол ноль.

Ниже приводится другой вывод оптической теоремы, вытекающий из закона сохранения частиц.

Дисперсионное соотношение. Аналогично тому, как это было сделано для диэлектрической постоянной, свяжем мнимую и вещественную части амплитуды рассеяния. Рассмотрим, например, рассеяние света заряженной системой. Напишем операторное соотношение $B = SA$. Здесь величина A характеризует амплитуду падающей волны, а B — амплитуду рассеянной волны.

В частном случае, когда амплитуда A берется в момент времени $t = -\infty$, а амплитуда B — в момент $t = +\infty$, оператор S эквивалентен введенной выше S -матрице. Отметим, что диэлектрическая постоянная является частным случаем оператора S , когда величины A и B не зависят от координат.

Сделаем предположение, что до момента времени $t = 0$ амплитуда падающей волны на некоторой контрольной плоскости, расположенной до рассеивающей системы, равна нулю. Относительно B можно утверждать, что $B(t) = 0$ для $t < t_1$, где $t_1 > 0$.

Перейдем к фурье-компонентам:

$$A_\omega = \int_0^\infty A(t) e^{i\omega t} dt, \quad B_\omega = \int_{t_1}^\infty B(t) e^{i\omega t} dt.$$

Так как $A(t) = 0$ при $t < 0$, то A_ω не имеет особенностей в верхней полуплоскости. Аналогично B_ω также не имеет особенностей в верхней полуплоскости. Из соотношения $B_\omega = SA_\omega$ следует, что величина S может иметь особенности лишь в нулях A_ω . Но S не может зависеть от частного вида A_ω , т. е. не может зависеть от расположения

нулей A_ω , следовательно, нули A_ω совпадают с нулями B_ω , и S не может иметь особенностей в верхней полуплоскости. Оператор S , как мы видели выше, линейно связан с амплитудой рассеяния $f(\omega^2)$ света. Величина $f(\infty)$ отлична от нуля и представляет собой сумму амплитуд рассеяния света на свободных частицах среды. Поэтому дисперсионное соотношение нужно применять не к $f(\omega^2)$, а к разности $f(\omega^2) - f(\infty)$. Оно аналогично дисперсионному соотношению для диэлектрической постоянной ϵ

$$f(\omega^2) = f(\infty) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{Im} [f(\omega_1^2) - f(\infty)]}{\omega_1^2 - \omega^2 - i\delta} d\omega_1^2. \quad (4.13)$$

Резонансное рассеяние при малых энергиях. При больших r волновая функция задачи рассеяния имеет следующий асимптотический вид:

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ipz} + \frac{f}{r} e^{ipr}.$$

Рассмотрим сначала сферически-симметричное рассеяние. Сферически-симметричная часть Ψ , описывающая рассеяние с $l = 0$, при больших r равна

$$\int \Psi \frac{d\Omega}{4\pi} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin pr}{pr} + \frac{f_0}{r} e^{ipr} = \frac{u}{r}.$$

Здесь f_0 — сферически-симметричная парциальная амплитуда. Функцию u можно записать в виде:

$$u = -\frac{1}{2ip} e^{-ipr} + \frac{1 + 2ipf_0}{2ip} e^{ipr}. \quad (4.14)$$

Ток частиц, составленный из выражения (4.14), равен разности токов, образованных из двух слагаемых u (в выражении для тока перекрестные слагаемые сокращаются). Если рассеивающий центр не поглощает и не испускает частиц, то эти токи равны друг другу. Условие их равенства имеет вид: $|1 + 2ipf_0|^2 = 1$, или, иначе,

$$f_0 - f_0^* = 2ipf_0f_0^*, \quad \text{Im } f_0 = p |f_0|^2, \quad (4.15)$$

откуда получаем

$$\text{Im } \frac{1}{f_0} = -p, \quad f_0 = \frac{1}{g_0(p^2) - ip}, \quad (4.16)$$

где $g_0(p^2)$ — вещественная функция p^2 . При малых энергиях она может быть разложена в ряд. Как мы увидим, в случае рассеяния на потенциальной яме параметром разложения является отношение энергии к глубине ямы.

Формула (4.15) представляет собой частный случай оптической теоремы (4.12), связывающей мнимую часть амплитуды рассеяния на угол ноль с полным сечением.

Исследуем теперь поведение произвольных парциальных амплитуд f_l при малых энергиях. По определению

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l (2l+1) P_l(\cos \theta).$$

Из формулы (4.10), вводя вместо T_{ab} амплитуду рассеяния и заменяя суммирование по s интегрированием по промежуточным импульсам p' (но не полагая, как в (4.11), $a = b$), находим:

$$\begin{aligned} \text{Im } f(\vartheta) &= \\ &= \frac{p}{4\pi} \int f^*(\gamma) f(\gamma') d\gamma'. \end{aligned}$$

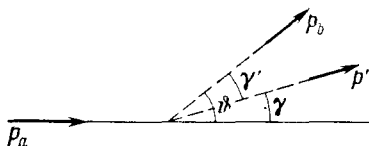


Рис. 40.

Здесь $\gamma = (\theta, \varphi)$ и $\gamma' = (\theta', \varphi')$ — углы, показанные на рис. 40. Разлагая амплитуды $f(\vartheta)$, $f(\gamma)$ и $f(\gamma')$ по парциальным амплитудам, получаем:

$$\begin{aligned} \sum_l (2l+1) \text{Im } f_l P_l(\cos \vartheta) &= \\ &= \frac{p}{4\pi} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) f_l^* f_{l'} \int P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta') d\gamma'. \end{aligned}$$

По теореме сложения для полиномов Лежандра $P_l(\cos \theta) = P_l(\cos \vartheta) P_l(\cos \theta') + \dots$. Отброшенные члены содержат выражения вида $\cos m(\varphi - \varphi')$. При интегрировании по φ' они обратятся в ноль. Используя свойство ортонормированности полиномов Лежандра, окончательно находим: $\text{Im } f_l = p |f_l|^2$. Отсюда

$$f_l = \frac{1}{g_l(p^2) - ip}.$$

Вернемся опять к сферически-симметричному рассеянию. Как мы увидим ниже (стр. 189), при малых p^2 существенно s -рассеяние. Разлагая $g_0(p^2)$ в ряд Тейлора и обозначая $-g_0(0) = \kappa$, находим:

$$f_0 \approx \frac{1}{-\kappa - ip + \alpha p^2}. \quad (4.17)$$

Величина f_0 имеет полюс в точке $p \approx i\kappa$ (второй корень квадратного уравнения $-\kappa - ip + \alpha p^2 = 0$ соответствует столь большим импульсам p , при которых неприменимо разложение g_0 в ряд Тейлора). Если рассматривать f как функцию энергии $p^2/2$ (массу частицы полагаем равной единице), то при $p^2 = 0$ имеется

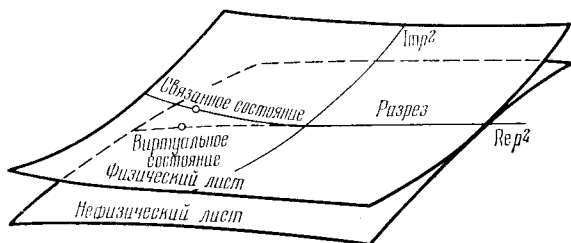


Рис. 41.

корневая точка ветвления. Чтобы $f_0(p^2)$ стала однозначной, проведем в плоскости p^2 разрез из начала координат вдоль вещественной положительной полуоси (рис. 41). Он делит плоскость p^2 на два листа. Если $\kappa > 0$, то полюс f_0 лежит на отрицательной вещественной полуоси первого листа, а если $\kappa < 0$, то — второго.

Величину κ можно выразить через энергию слабосвязанного состояния в рассеивающей яме (если такое состояние существует). Подставляя (4.17) в (4.14), получаем:

$$u \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} -\frac{1}{2ip} \left(e^{-ipr} - \frac{-\kappa + ip}{-\kappa - ip} e^{ipr} \right).$$

Функцию u можно аналитически продолжить в область отрицательных энергий, что соответствует мнимым значениям p . Пусть энергия связанного состояния равна $-E_0$. Обозначим $\kappa_0 = \sqrt{2E_0}$. Тогда при $p = \pm i\kappa_0$ волновая функция должна стать волновой функцией связан-

ного состояния. Поэтому в выражении для u при $p = \pm i\kappa_0$ не должно оставаться слагаемого с растущей экспонентой.

При $p = i\kappa_0$ получаем

$$u = \frac{1}{2\kappa_0} \left(e^{\kappa_0 r} - \frac{-\kappa - \kappa_0}{-\kappa + \kappa_0} e^{-\kappa_0 r} \right).$$

Для того чтобы можно было пренебречь растущей экспонентой, необходимо положить $\kappa = \kappa_0 > 0$. Таким образом, в случае связанного состояния амплитуда рассеяния имеет полюс при $p = i\kappa_0$

$$f \approx - \frac{1}{\kappa_0 + ip}. \quad (4.18)$$

Положение полюса определяется энергией связанного состояния. Эта формула имеет смысл, когда энергия связанного состояния E_0 мала по сравнению с глубиной потенциальной ямы. В таком случае при малых энергиях рассеиваемых частиц происходит резонансное увеличение эффективного сечения рассеяния, и можно пренебречь влиянием потенциального рассеяния и влиянием других уровней.

Так как $\kappa_0 > 0$, то полюс, соответствующий связанному состоянию, лежит на первом листе плоскости p^2 . Можно показать, что все полюса на первом листе представляют собой связанные состояния. По этой причине первый лист называют физическим (см. рис. 41).

В случае $\kappa < 0$ полюс амплитуды рассеяния лежит на втором (нефизическом) листе и соответствует так называемому виртуальному состоянию. Например, синглетная амплитуда рассеяния нейтрона на протоне имеет полюс при энергии ~ -70 кэв, соответствующий виртуальному состоянию. Такой полюс проявляется как резонанс в рассеянии при малых энергиях, однако не соответствует связанному состоянию.

На нефизическом листе могут быть и другие особенности. Они могут находиться (в отличие от физического листа) в любой точке комплексной плоскости. Представляют особый интерес полюса, расположенные вблизи положительной вещественной полуоси p^2 в точках $p^2 = p_0^2 - i\gamma$ ($\gamma > 0$). Каждый из таких полюсов сильно влияет на амплитуду рассеяния при энергии, близкой к $p_0^2/2$

и приводит к резонансному рассеянию с шириной γ . Эти полюса определяют так называемые квазистационарные состояния. Ширина γ равна обратному времени жизни этого состояния (стр. 146).

ЗАДАЧА

Из закона сохранения частиц получить (аналогично тому, как это было сделано в тексте) оптическую теорему в случае поглощения, определяемого сечением σ_c .

Ответ. $\text{Im } f_0 = \frac{p}{4\pi} (4\pi |f_0|^2 + \sigma_c)$.

Нерезонансное рассеяние при малых энергиях. Исследуем аналитические свойства амплитуды рассеяния $f(p, \theta)$ при малых энергиях. Сначала определим, при каких условиях функция $f(p, \theta)$ аналитична в точке $p = 0$. Для этого напомним уравнение, связывающее $f(p, \theta)$ с волновой функцией задачи рассеяния $\Psi_p = e^{ipr} u_p(r)$. Здесь u_p — функция, модулирующая плоскую волну. Как мы увидим, особенности $f(p, \theta)$ при $p = 0$ определяются поведением Ψ_p и V на больших расстояниях r , где

$$\Psi_p \rightarrow e^{ipr} + \frac{f}{r} e^{ipr} \quad \text{и} \quad u_p \rightarrow 1 + \frac{f}{r} e^{i(pr - pr)},$$

т. е. $u_p \approx 1$ при $r \rightarrow \infty$. Вопрос об аналитичности при $p \rightarrow 0$ может быть рассмотрен в борновском приближении. Действительно

$$f(p, \theta) = -\frac{1}{2\pi} \int e^{-iqr} V(r) u_p(r) dr \sim -\frac{1}{2\pi} \int e^{-iqr} V(r) dr,$$

где

$$q^2 = 2p^2 - 2pp'.$$

Если $V(r)$ убывает при $r \rightarrow \infty$ экспоненциально (или более сильно), то все производные от f по p конечны (соответствующие интегралы сходятся), т. е. f аналитична при $p = 0$.

Пусть $V(r)$ убывает при $r \rightarrow \infty$ степенным образом. Продифференцируем $f(p, \theta)$ по p достаточно большое число раз. При каждом дифференцировании экспоненты e^{-iqr} в подинтегральное выражение добавляется множитель, пропорциональный r . Он ослабляет убывание

этого выражения при $r \rightarrow \infty$. Следовательно, достаточно высокая производная при $p \rightarrow 0$ расходится. Таким образом, в случае потенциалов, убывающих при $r \rightarrow \infty$ степенным образом, амплитуда рассеяния при $p = 0$ имеет особую точку.

При большом показателе степени эта особенность не оказывает заметного влияния на рассеяние частиц малых энергий, так как проявляется лишь в очень высоких производных от амплитуды рассеяния.

Найдем зависимость амплитуды рассеяния от p при малых p в случае достаточно быстро убывающих на бесконечности потенциалов (экспоненциально или сильнее). Для этой цели удобно перейти от переменных p , θ к переменным pp' и p^2 . Тогда по определению парциальных амплитуд рассеяния

$$f = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l \left(\frac{pp'}{p^2} \right).$$

Как известно, функция P_l является полиномом l -й степени, а именно:

$$P_l \left(\frac{pp'}{p^2} \right) = C_1 \left(\frac{pp'}{p^2} \right)^l + C_2 \left(\frac{pp'}{p^2} \right)^{l-2} + \dots$$

Рассмотрим поведение амплитуды при фиксированном значении pp' и при $p^2 \rightarrow 0$. Это означает, что мы рассматриваем аналитическое продолжение амплитуды в нефизическую область углов $\cos \theta \rightarrow \infty$ и требуем аналитичности в этой области.

Это требование эквивалентно аналитичности по p^2 при фиксированном q^2 , которая легко может быть доказана для достаточно быстро убывающих потенциалов и особенно очевидна в борновском приближении, когда f вообще не зависит от p^2 при заданном q^2 .

При фиксированном значении pp' и при $p \rightarrow 0$ функция f не имеет особенностей по p только при

$$f_l = d_1 p^{2l} + d_2 p^{2l+1} + \dots$$

Поэтому, если нет физических причин для обращения d_1 в ноль, то при малых p амплитуда f_l пропорциональна p^{2l} . Здесь $d_1 \sim R^{2l+1}$, где R — характерная длина потенциала.

Фаза рассеяния δ_l связана с f_l известным соотношением *)

$$f_l = \frac{(e^{2i\delta_l} - 1)}{2ip}.$$

При малых p отсюда находим: $\delta_l \sim p^{2l+1}$.

Рассеяние на потенциальной яме. В качестве примера, иллюстрирующего аналитические свойства амплитуды рассеяния, рассмотрим рассеяние частицы с малой энергией на потенциальной яме. Предположим, что яма имеет достаточно резкий край. Обозначим через R эффективный размер ямы. Будем рассматривать столь малые энергии E налетающей частицы, что выполняется условие $pR \ll 1$, где $p = \sqrt{2E}$. Как мы только что убедились, при выполнении этого условия существенно лишь S -рассеяние.

Вне ямы функция $u(r) = r\Psi(r)$ имеет вид, совпадающий со своим асимптотическим выражением

$$u(r) = \frac{\sin pr}{p} + f_0 e^{ipr}.$$

При $r \sim R$ имеем:

$$u(r) \approx r + f_0 (1 + ipr).$$

Обозначим логарифмическую производную волновой функции внутри ямы при $r \sim R$ через $g_0(E)$. Сшивая логарифмические производные внутренней и внешней волновой функции, находим:

$$g_0(E) = \frac{1 + ipf_0}{f_0},$$

откуда

$$f_0 = \frac{1}{g_0(E) - ip}.$$

Этот результат представляет собой другой вывод формулы (4.16).

Характер $g_0(E)$ можно увидеть на примере прямоугольной ямы. Обозначим глубину ямы через U_0 . Тогда внутри ямы $u(r) = A \sin kr$, где $k = \sqrt{2(U_0 + E)}$.

*) Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 547.

Следовательно,

$$g_0(E) = k \operatorname{ctg} kR.$$

Выражение, стоящее в правой части последнего равенства, разлагается в ряд по целым степеням малой величины E/U_0 . Таким образом, $g_0(E)$ — действительно аналитическая функция энергии E .

Если внутри ямы имеется связанное состояние с энергией $-E_0$, то волновая функция вне ямы имеет вид: $u(r) = Be^{-\sqrt{2E_0}r}$. Сшивая логарифмические производные, как это делалось выше, находим: $g_0(-E_0) = -\sqrt{2E_0} \equiv \equiv -\kappa_0$. Если энергии E и E_0 малы по сравнению с U_0 , то можно утверждать, что $g_0(E) \approx g_0(-E_0) = -\kappa_0$, и мы получаем снова результат (4.18).

Малость $g_0(E) = k \operatorname{ctg} kR$ достигается, когда $kR \approx \approx \pi/2$. Получаем известное условие появления связанного уровня в прямоугольной яме: $U_0 > \pi^2/8R^2$.

Аналогичным способом можно рассмотреть случай ямы с барьером *). Результат имеет вид

$$f_0 = \frac{1}{-ip - \kappa + \alpha p^2}.$$

Здесь $\alpha \sim -R_1 e^{-\xi}$, причем $\xi = 2 \int_{R_1}^{R_2} \sqrt{2(V-E)} dr$ — показатель проницаемости барьера, а R_1 и R_2 — классические точки поворота.

Аналитические свойства волновой функции. Согласно теореме Пуанкаре особые точки решения линейного дифференциального уравнения могут быть только в особых точках коэффициентов этого уравнения (кроме бесконечно удаленной точки). Например, осцилляторный потенциал $V = \alpha x^2$ для одномерного уравнения Шредингера не имеет особых точек в конечной области пространства. Поэтому и решение уравнения Шредингера может иметь особую точку только на бесконечности. То же справедливо для трехмерного случая ($V = \alpha r^2$). Например, волновая функция основного состояния $\Psi \sim \exp(-\sqrt{2\alpha}r^2)$.

Рассмотрим аналитические свойства волновой функции $\Psi(r)$ по переменной r для частицы, движущейся в произ-

*) А. Б. Мигдал, А. М. Переломов, В. С. Попов, ЯФ 14, 829 (1971).

вольном сферически-симметричном потенциале с орбитальным моментом, равным нулю. В системе нет выделенного направления, следовательно, функция Ψ аналитична по переменной r^2 . Волновая функция может иметь особенности только в тех точках, где имеет особенность потенциал как функция r^2 .

Однако особые точки коэффициентов могут и не быть особыми точками решения.

Например, в уравнении

$$u_l'' + 2(E - V_l) u_l = 0,$$

где $V_l = V + l(l+1)/2r^2$, точка $r = 0$ является особой точкой коэффициента уравнения. Пусть при малых r можно пренебречь величиной V по сравнению с $l(l+1)/r^2$. Тогда радиальное уравнение Шредингера приобретает вид

$$-r^2 u_l'' + l(l+1) u_l = 0,$$

откуда $u_l \sim r^{l+1}$ или $u_l \sim r^{-l}$. Итак, существует решение $u_l \sim r^{l+1}$, регулярное в точке $r = 0$.

Кулоновский потенциал $V = Z/r = Z/\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ при фиксированных y и z имеет корневую точку ветвления по переменной x . Следовательно, в той же точке может иметь особенность волновая функция. Например, для основного состояния частицы, как известно,

$$\Psi \sim \exp[-\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}].$$

В частности, начало координат является особой точкой. Мы видели (стр. 55), что эта особенность кулоновских волновых функций определяет характер энергетической зависимости сечения фотоэффекта.

В дальнейшем мы еще вернемся к свойствам аналитичности Ψ -функции, но не как функции r , а как функции энергии.

Одночастичные функции сплошного спектра при малой энергии. Получим удобное для дальнейших вычислений выражение для функций сплошного спектра с малой энергией ϵ_r . При расчете матричных элементов обычно входят функции на расстояниях порядка радиуса R потенциальной ямы. Покажем, что если $pR \ll 1$, то волновая функция $\varphi_p(r)$ может быть записана как произведение мно-

жителя, зависящего только от p , на функцию $\varphi_0(r)$, удовлетворяющую уравнению Шредингера с $p = 0$.

Действительно, оценка $\Delta\varphi_0$ есть $\Delta\varphi_0 \sim \varphi_0/R^2$, и поэтому в уравнении для $\varphi_p(r)$

$$\Delta\varphi_p(r) + 2(\varepsilon_p - V)\varphi_p(r) = 0$$

величиной $\varepsilon_p = p^2/2$ при условии $pR \ll 1$ можно пренебречь.

Итак, будем изображать φ_p в виде *)

$$\varphi_p(r) = \chi(p)\varphi_0(r). \quad (4.19)$$

Для простоты ограничимся сферически-симметричными состояниями. В качестве φ_0 выберем решение уравнения Шредингера, конечное в нуле и удовлетворяющее на бесконечности условию

$$\varphi_0(r) = \frac{1}{r} \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

При энергии связи ε_0 , стремящейся к нулю, функция φ_0 отличается только нормировочным множителем от функции связанного состояния. Для двух частиц одинаковой массы (например, для случая дейтона) легко получить

$$\varphi_d = a\varphi_0, \quad \text{где } a = \frac{\sqrt[4]{M\varepsilon_0}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Функции $\varphi_p(r)$ будем предполагать нормированными на интервал dp . Тогда вне ямы сферическая часть $\varphi_p(r)$ имеет вид:

$$\frac{u_p(r)}{r} = \frac{\sin(pr + \delta_0(p))}{pr}.$$

Как мы видели выше, при малых p сферическая парциальная амплитуда рассеяния f_0 имеет полюс в точке $p = i\kappa$ ($\kappa > 0$ для реального уровня и $\kappa < 0$ для виртуального). В окрестности этого полюса резонансно

*) Аналогичное свойство функций сплошного спектра для энергий, близких к энергии квазистационарного уровня, использовано в работе В. М. Г а л и ц к о г о, В. Ф. Ч е л ь ц о в а (Nucl. Phys. 56, 86 (1964)); см. также сноску на стр. 191.

возрастает и фаза $\delta_0(p)$, связанная с f_0 соотношением:

$$|f_0| = \frac{1}{p} |\sin \delta(p)|.$$

Следовательно, имеется широкая область $R \lesssim r \ll \ll 1/p$, где $\delta_0(p) \gg pr$; таким образом, имеем:

$$u_p \approx \frac{1}{p} \sin \delta_0(p),$$

тогда как rf_0 в этой области в силу нормировочного условия равно 1.

Поэтому, используя (4.17), находим:

$$|\chi(p)|^2 = \frac{1}{p^2} \sin^2 \delta_0(p) = |f_0|^2 = \frac{1}{(\alpha p^2 - \kappa)^2 + p^2}. \quad (4.20)$$

Вдали от полюса, т. е. при $p^2 \sim U_0$ (U_0 — глубина ямы), $|\chi(p)|^2 \sim 1/U_0$; вблизи полюса (например, при $\alpha p^2 - \kappa = 0$) имеем $|\chi(p)|^2 \sim 1/E$. Ниже будет рассмотрено несколько примеров использования этого свойства волновых функций.

Итак, при малых p и κ возникает усиление волновых функций сплошного спектра на малых расстояниях в $\sqrt{U_0/E}$ раз.

Разделение волновой функции $\varphi_p(r)$ на произведение двух членов, один из которых зависит от r , а другой — от p , позволяет очень просто вычислять матричные элементы. Интегрирование по r сводится просто к взятию среднего по функции φ_0 .

3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ

Теория ядерных реакций с образованием медленных частиц. Приведем еще один пример того, как учет особенности волновой функции позволяет решить сложную задачу. В данном случае будет учтено существование полюса не в амплитуде рассеяния на потенциальной яме, как это было в задаче предыдущего раздела, а в амплитуде рассеяния двух нуклонов, появившихся в результате реакции (Мигдал, 1950; Ватсон, 1952).

Рассмотрим ядерную реакцию, в результате которой наряду с другими частицами образуются два нуклона с малой относительной энергией. Такой случай осуществляется, например, при рождении π -мезона в столкновении двух нуклонов с энергией, близкой к энергии образования пиона, или при разрушении дейтона нейтроном, когда энергия вылетающего протона близка к своему максимальному значению и относительная энергия нейтронов достаточно мала. Сечение такого процесса наряду с несущественными множителями будет пропорционально квадрату матричного элемента, содержащего волновую функцию относительного движения рассматриваемой пары нуклонов,

$$\sigma \sim |(\Phi, \varphi_p(r_1 - r_2))|^2. \quad (4.21)$$

Величина Φ содержит интегралы по координатам остальных частиц, участвующих в реакции, и при малом относительном импульсе p нечувствительна к величине относительной энергии рассматриваемых нуклонов. Так как в интеграле (4.21) существенны расстояния $|r_1 - r_2| \sim r_0$, где r_0 — радиус сил ($pr_0 \ll 1$), то можно использовать для φ_p соотношение (4.19). Поэтому сечение для выбранной в (4.20) нормировки φ_p имеет вид

$$d\sigma = A_1 |f|^2 d\mathbf{p} = A \frac{d\mathbf{p}}{E + \varepsilon_0}, \quad (4.22)$$

где $E = p^2/M$ — энергия относительного движения (приведенная масса нуклонов равна $M/2$). Здесь мы использовали выражение (4.17) для амплитуды S рассеяния двух нуклонов. Величина ε_0 зависит от типа и суммарного спина нуклонов. Для нейтрона и протона со спином единица $\varepsilon_0 = 2,2 \text{ Мэв}$ (энергия связи дейтона), для спина нуль $\varepsilon_0 \approx 70 \text{ кэв}$ (виртуальный уровень). Для двух нейтронов полюс в амплитуде имеется только при спине нуль ($\varepsilon_0 \simeq 70 \text{ Мэв}$, см. ниже). Два нейтрона со спином 1 не могут согласно принципу Паули находиться в S -состоянии и поэтому имеют малую нерезонансную амплитуду рассеяния (согласно стр. 189 амплитуда с $l \neq 0$ падает с уменьшением p). В случае двух протонов формула (4.22) усложняется их кулоновским отталкиванием.

Так как $dp \sim \sqrt{E} dE$, то распределение по относительным энергиям имеет вид

$$dW_E = \text{const} \frac{\sqrt{E} dE}{E + \varepsilon_0}. \quad (4.23)$$

График функции dW_E/dE показан на рис. 42. Сечение реакции имеет максимум при $E = \varepsilon_0$.

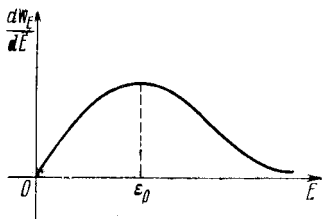


Рис. 42.

Найдем вероятности реакции в зависимости от угла между вылетевшими нуклонами. Обозначим через $p_{\parallel}$ проекцию p на направление импульса P центра инерции двух нуклонов, а через $p_{\perp}$ — проекцию p на плоскость, перпендикулярную P . Угол между импульсами $(p + P)/2$ первого и $(-p + P)/2$ второго нуклонов определяется выражением

$$\sin \theta = \frac{|(p + P) \times (-p + P)|}{|p + P| \cdot |-p + P|} \approx \frac{2p_{\perp}}{P} \ll 1.$$

Мы предположили, что $p \ll P$. Фазовый объем dp в переменных $p_{\parallel}$, $p_{\perp}$ пропорционален $p_{\perp} dp_{\perp} dp_{\parallel}$. Подставляя в (4.22), находим

$$dW_p = \text{const} \frac{\theta d\theta dp_{\parallel}}{M\varepsilon_0 + p_{\parallel}^2 + \frac{P^2 \theta^2}{4}}.$$

Интегрируя по $dp_{\parallel}$, находим

$$dW_{\theta} = \text{const} \frac{\theta d\theta}{\sqrt{\theta^2 + \varepsilon_0/E_0}}, \quad (4.24)$$

где $E_0 = P^2/4M$ — энергия центра инерции двух нуклонов. Таким образом, характерные углы имеют порядок $\sqrt{\varepsilon_0/E_0}$.

Изложенная теория предсказала возможность определения константы ε_0 для двух нейтронов по характеру энергетического распределения третьей частицы. Такие опыты были выполнены на реакции $d + n = p + 2n$

(В. К. Войтовецкий и др. 1965). Найдем спектр протонов, из которого была определена константа ϵ_0 .

Обозначим импульс протона в системе центра инерции трех нуклонов через P_p . Импульс системы двух нейтронов равен $-P_p$. Полная энергия системы E_t складывается из энергии протона, энергии центра инерции двух нейтронов и энергии их относительного движения E

$$E_t = \frac{1}{2M} P_p^2 + \frac{1}{4M} P_p^2 + E = \frac{3}{2} E_p + E.$$

Максимальная возможная энергия протонов E_p^m , соответствующая $E = 0$, будет $E_p^m = \frac{2}{3} E_t$.

Распределение вероятности в функции E_p дается выражением, которое получается из (4.23) переходом к переменной E_p ,

$$dW_{E_p} = \text{const} \frac{\sqrt{E_p^m - E_p} dE_p}{\epsilon_0 + \frac{3}{2} (E_p^m - E_p)}. \quad (4.25)$$

Сравнение этого распределения с экспериментальным показало, что $\epsilon_0 \simeq 70$ кэв. Кроме того, было показано, что этот уровень — виртуальный, так как в противном случае в распределении протонов возникла бы монохроматическая линия с энергией $E_p = E_p^m + \epsilon_0$, соответствующая связанному состоянию двух нейтронов, чего не наблюдалось на опыте.

Таким образом, энергия виртуального уровня двух нейтронов со спином 0 совпала с энергией виртуального уровня нейтрона и протона с тем же спином, в согласии с изотопической инвариантностью ядерных сил. Теория позволяет рассчитать отношение вероятности вылета свободных нейтрона и протона к вероятности вылета дейтона. Отношение этих вероятностей согласно (4.21) дается выражением

$$dW = \frac{|\langle \Phi, \varphi_p(r_1 - r_2) \rangle|^2}{|\langle \Phi, \varphi_d(r_1 - r_2) \rangle|^2} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}. \quad (4.26)$$

Используя выражения $\varphi_p = \chi(p) \varphi_0$, $\varphi_d \simeq a \varphi_0$ и нормировку функции φ_d связанного состояния, приведенную

в предыдущем разделе (стр. 193), получим

$$d\sigma_{n,p}^{\uparrow,\uparrow} = \sigma_d \frac{1}{8\pi^2} \frac{V \bar{E} dE}{\sqrt{\varepsilon_0} E + \varepsilon_0}, \quad (4.27)$$

где $d\sigma_{n,p}^{\uparrow,\uparrow}$ соответствует свободным нейтрону и протону с параллельными спинами. Для грубой оценки отношения полных сечений предположим, что (4.27) справедливо во всей области значений E до E_m . Находим

$$\frac{\sigma_0}{\int d\sigma} \simeq 4 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{E_m}}. \quad (4.28)$$

Взаимодействующие частицы в потенциальной яме. Найденный в предыдущем разделе простой вид волновых функций при малых энергиях позволяет решить задачу о движении двух взаимодействующих частиц в потенциальной яме *). Гамильтониан задачи имеет вид

$$H = H_1(r_1) + H_2(r_2) + H'(r_1, r_2). \quad (4.29)$$

Предположим, что найдены собственные функции $\varphi_\lambda^{(1)}(r_1)$, $\varphi_\lambda^{(2)}(r_2)$ одночастичной задачи, удовлетворяющие уравнению

$$H_{1,2}(r) \varphi_\lambda^{(1,2)}(r) = \varepsilon_\lambda^{(1,2)} \varphi_\lambda^{(1,2)}(r), \quad (4.30)$$

и предположим, что имеется связанное состояние с моментом нуль и с энергией ε_0 , близкой к нулю. Тогда функции $\varphi_p^{(l)}(r)$ для $pr \ll 1$ с моментом l можно записать аналогично формулам предыдущего раздела в виде

$$\varphi_p^{(l)}(r) = \varphi_0^{(l)}(r) \chi^{(l)}(p),$$

где $\chi^0(p) \equiv \chi(p)$ определяется выражением (4.20). При малом r функция связанного состояния φ_ε отличается от $\varphi_0^{(0)}$ только нормировочным множителем a (см. ниже).

Разложим собственную функцию $\Psi(r_1, r_2)$, являющуюся решением уравнения

$$H\Psi = E\Psi, \quad (4.31)$$

*) А. Б. М и г д а л, ЯФ XVI, 8 (1972).

по системе собственных функций в отсутствии взаимодействия H'

$$\begin{aligned} \Psi = & \sum_{l, l' \neq 0} \int dp dp' C_{ll'}(p, p') \varphi_p^{(l)}(r_1) \varphi_{p'}^{(l')}(r_2) + \\ & + \sum_{l \neq 0} \int dp \{C_{l0}(p) \varphi_p^{(l)}(r_1) \varphi_{\varepsilon_0}(r_2) + C_{0l}(p) \varphi_{\varepsilon_0}(r_1) \varphi_p^{(l)}(r_2)\} + \\ & + C_{00} \varphi_{\varepsilon_0}(r_1) \varphi_{\varepsilon_0}(r_2). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Для простоты мы предположили, что обе частицы имеют одинаковые волновые функции φ_λ . Равенство (4.32) можно символически записать в виде

$$\Psi = \sum C_\alpha \Psi_\alpha^0. \quad (4.33)$$

Тогда уравнение Шредингера (4.31) принимает вид

$$(E - E_\alpha^0) C_\alpha = (\Psi_\alpha^0 H' \Psi) = \sum_\beta (\Psi_\alpha^0 H' \Psi_\beta^0) C_\beta. \quad (4.34)$$

В этом уравнении мы не можем использовать простой вид функций $\Psi_\alpha^0(r_1, r_2)$ при малых $r_{1,2}$, так как в интегралах $C_\alpha = (\Psi_\alpha^0, \Psi)$ существенны как большие, так и малые расстояния.

Удобнее написать уравнение для величины $A_\alpha = (\Psi_\alpha^0 H' \Psi)$, в которой, как мы увидим, существенны только малые расстояния $r_{1,2} \sim R$.

Из (4.34) находим

$$A_\alpha = \sum_\beta C_\beta (\Psi_\alpha^0 H' \Psi_\beta^0) = \sum_\beta \frac{(\Psi_\alpha^0 H' \Psi_\beta^0)}{E - E_\beta^0} A_\beta. \quad (4.35)$$

Так как на малых расстояниях состояния с моментом $l = 0$ усилены благодаря присутствию связанного состояния (см. (4.20)), то в разложении (4.32) можно оставить только состояния с моментом $l = 0$. (Можно показать, что учет членов с $l \neq 0$ приводит к существенным поправкам только в том случае, когда между частицами есть резонансное взаимодействие (Дюгаев, 1974).) Тогда Ψ приобретает простой вид

$$\Psi = C \varphi_0(r_1) \varphi_0(r_2), \quad (4.36)$$

а система функций Ψ_α^0 задается выражением

$$\Psi_\alpha^0 = \begin{cases} \chi(p_1) \chi(p_2) \varphi_0(r_1) \varphi_0(r_2) & (2 \text{ частицы в сплошном спектре}), \\ \chi(p) a \varphi_0(r_1) \varphi_0(r_2) & (1 \text{ свободная частица}), \\ a^2 \varphi_0(r_1) \varphi_0(r_2) & (\text{обе частицы связаны}). \end{cases} \quad (4.37)$$

Здесь $\varphi_p(r)$ нормирована на интервал dp (т. е. $\varphi_p(r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(pr + \delta)}{r}$), поэтому нормировка φ_0 отличается от введенной на стр. 193 множителем $\sqrt{\frac{2}{\pi}} p$.

Все матричные элементы вида $(\Psi_\alpha^0 H' \Psi_\beta^0)$ определяются поведением Ψ_α^0 на малых расстояниях от потенциальной ямы. Действительно, предполагая, что взаимодействие H' сильно убывает, когда $|r_1 - r_2| \gg r_0$, получим $(\Psi_\alpha^0 H' \Psi_\beta^0) \sim$

$$\begin{aligned} & \sim \int dr_1 dr_2 \varphi_{\lambda_1}(r_1) \varphi_{\lambda_2}(r_2) H'(r_1 - r_2) \varphi_{\lambda_3}(r_1) \varphi_{\lambda_4}(r_2) \sim \\ & \sim \int dr r^2 (\varphi_0(r))^4 \int d(r_1 - r_2) H'(r_1 - r_2). \end{aligned}$$

Из-за убывания $\varphi_0 \sim 1/r$ первый из этих интегралов определяется малыми расстояниями от ямы $r \sim R$, где существен резонансный характер функций φ_λ .

Записывая $\varphi_{\varepsilon_0}(r)$ в виде

$$\varphi_{\varepsilon_0}(r) \underset{r \gg R}{=} \frac{ae^{-\kappa r}}{r} \sqrt{\frac{2}{\pi}} p \quad (\kappa = \sqrt{2m\varepsilon_0})$$

и предполагая, что $\kappa R \ll 1$, находим

$$a^2 \simeq \frac{\pi \kappa}{p^2}. \quad (4.38)$$

При подстановке (4.36), (4.37) и (4.38) в уравнение (4.35) константа C сокращается и получается

$$1 = H'_0 \left\{ \frac{a^4}{E - 2\varepsilon_0} + 2a^2 \int \frac{\chi(p) dp}{E - \varepsilon_0 - \varepsilon_p} + \int \frac{\chi(p_1) \chi(p_2)}{E - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2}} dp_1 dp_2 \right\}, \quad (4.39)$$

где $H'_0 = (\varphi_0(r_1) \varphi_0(r_2) H' \varphi_0(r_1) \varphi_0(r_2))$.

Таким образом, использование резонансного характера функций $\varphi_p^{(0)}$ позволило свести сложное интегральное

уравнение (4.35) к простому алгебраическому уравнению (4.39) для определения энергии E . Изучение этого уравнения в задаче о движении двух нуклонов в потенциальной яме ядра приводит к заключению, что в тех случаях, когда имеется одночастичный уровень с близкой к нулю энергией, у поверхности ядра должно существовать связанное состояние двух нейтронов (или двух протонов).

Теория прямых реакций. При финитном движении классической частицы она все время находится в области действия сил. В квантовой физике это не так, система связанных частиц может на короткое время как бы распадаться на свободные частицы. Такие временные распады называются виртуальными переходами. Возможность виртуальных переходов порождает явления, кажущиеся на первый взгляд парадоксальными. Например, налетающий на ядро протон в некоторой доле случаев выбивает из него частицу так, как если бы произошел акт упругого рассеяния протона на свободной, а не на связанной частице. В частности, в реакции $(p, 2p)$ угол разлета двух протонов близок к 90° , как при рассеянии свободных частиц с одинаковой массой, одна из которых до столкновения покоилась. Еще более поразительна реакция выбивания дейтронов (p, pd) , в которой также наблюдаются кинематические корреляции, свойственные упругому pd -рассеянию на свободных дейтонах. Поскольку энергия связи дейтона значительно меньше, чем энергия взаимодействия нуклонов в ядре, дейтон в качестве стабильного образования существовать в ядре не может. Это не исключает, однако, кратковременного образования свободного дейтона в результате виртуального перехода. Налетающий на ядро протон, ударив по такому свободному дейтону, передает ему энергию и импульс по законам упругого столкновения. Поэтому сечения реакций $(p, 2p)$, (p, pd) и т. п. могут быть приближенно выражены через амплитуды виртуального распада и упругого рассеяния свободных частиц. Ниже мы увидим, каковы условия этого приближения. Эти реакции являются частным случаем широкого круга процессов, получивших названия прямых реакций. Для них характерна передача почти всей вносимой в ядро энергии (и импульса) какой-либо одной частице, тогда как остальная часть ядра не участвует в процессе.

С теоретической точки зрения прямые реакции выделены тем, что амплитуды этих реакций, рассматриваемые как аналитические функции кинематических переменных, имеют близко расположенные к физической области особенности по переданным импульсам *).

Рассмотрим в качестве примера упомянутую прямую реакцию $(p, 2p)$. Пусть на ядро $X(N, Z)$ падает протон с достаточно большой энергией $E(p)$ и происходит реакция

$$X(N, Z) + p \rightarrow Y(N, Z - 1) + 2p. \quad (4.40)$$

Тогда амплитуда прямой реакции будет определяться формулой для амплитуды перехода через промежуточное состояние

$$A(p, q; p', q') = \frac{\Phi(q) F(p, q; p', q')}{E_X - E_Y - E(q)}, \quad (4.41)$$

где $\Phi(q)$ — амплитуда виртуального перехода ядра X в ядро Y и свободный протон с импульсом q , а $F(p, q; p', q')$ — амплитуда рассеяния налетающего протона на виртуальном протоне, E_X, E_Y — внутренние энергии ядер X и Y . Следует подчеркнуть, что (4.41) — общая квантовомеханическая формула для амплитуды перехода через заданное промежуточное состояние и отнюдь не предполагает малости взаимодействия между частицами. Учет энергии отдачи ядра Y приводит к изменению эффективной массы в энергии виртуального протона

$$E(q) = \frac{q^2}{2M_{\text{эфф}}}, M_{\text{эфф}} = \frac{MM_Y}{M + M_Y}. \text{ Величина } E_Y - E_X = E_0 > 0$$

представляет собой энергию связи протона в ядре Y . Функция $\Phi(q)$ определяется матричным элементом

$$\Phi(q) = (\Psi_X^{N, Z}(r_j, r), \Psi_Y^{N, Z-1}(r_j) e^{iqr}),$$

где r_j — координаты всех нуклонов, кроме рассматриваемых (мы опускаем спинные значки).

Для грубой оценки зависимости $\Phi(q)$ можно предположить, что волновые функции всех остальных нуклонов

*) Аналитические свойства амплитуд прямых реакций впервые были исследованы в работе И. С. Шапиро, ЖЭТФ 41, 1616 (1961), см. также И. С. Шапиро, УФН 92, 549 (1967).

в ядре Y мало отличаются от волновых функций этих нуклонов в ядре X . Допустим для простоты, что ядро X отличается от ядра Y только наличием протона в состоянии λ вблизи границы Ферми. Тогда

$$\Phi(q) = (\varphi_\lambda(r) e^{iqr}). \quad (4.42)$$

Для иллюстрации вида $\Phi(q)$ рассмотрим случай, когда орбитальный момент состояния равен нулю. Предполагая, что ядерный потенциал, в котором движется протон, имеет форму прямоугольной ямы радиуса $R \gg 1/p_F$ (p_F — импульс на границе Ферми), имеем $\varphi_\lambda = \frac{\sin p_F r}{r} \frac{1}{\sqrt{2\pi R}}$ и

$$\begin{aligned} \Phi(q) &= \sqrt{\frac{2\pi}{R}} \int_0^R 2 \sin p_F r \cdot \sin qr \cdot dr = \\ &= \sqrt{2\pi R} \left\{ \frac{\sin(q - p_F) R}{(q - p_F) R} - \frac{\sin(q + p_F) R}{(q + p_F) R} \right\}. \end{aligned}$$

Эта функция имеет максимум при $q = p_F$. Кроме того, знаменатель выражения (4.41) убывает при $E(q) > E_0$ ($= 5-10$ мэв), поэтому в (4.41) существенны малые q , при которых амплитуда рассеяния F мало отличается от амплитуды рассеяния на покоящемся протоне. Таким образом, формула (4.41) позволяет выразить сечение рассматриваемого процесса через сечение протон-протонного рассеяния. Для вычисления $\Phi(q)$, как мы видим, требуется сделать предположение о характере Ψ -функций ядер X и Y . При достаточно малом E_0 зависимость сечения реакции от q при малых q определяется резонансным знаменателем (4.41) независимо от вида функции $\Phi(q)$. Приближение, которое мы использовали при написании (4.41), состоит в предположении, что другие механизмы реакции, идущие более чем через одну виртуальную частицу, вносят меньший вклад. Это обеспечивается малостью знаменателя (4.41).

Аналогичным образом рассматриваются и более сложные реакции.

Пороговые особенности амплитуды рассеяния. Рассмотрим особенности амплитуды рассеяния вблизи порога рождения частицы. Сечение рождения частицы σ пропорционально статистическому весу $\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3}$ конечных состояний

частицы. Учитывая закон сохранения энергии, получаем

$$\sigma \sim \int \delta(E - I - E') \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \sim \sqrt{E - I}. \quad (4.43)$$

Здесь I — порог реакции, а E — энергия налетающей частицы.

Найдем сечение упругого рассеяния σ_s вблизи порога реакции. Для этого определим вид S -матрицы в этой области. Ввиду малости энергии вылетающей частицы неупругий канал скажется лишь на нулевом парциальном члене S -матрицы ($l = 0$) (Вигнер 1948; Базь 1957).

Выражение (4.14) можно записать, введя S_0 -матрицу, в виде

$$u = \frac{S_0 e^{ipr} - e^{-ipr}}{2ip}.$$

Вычисляя поток частиц через сферу радиуса R и деля на

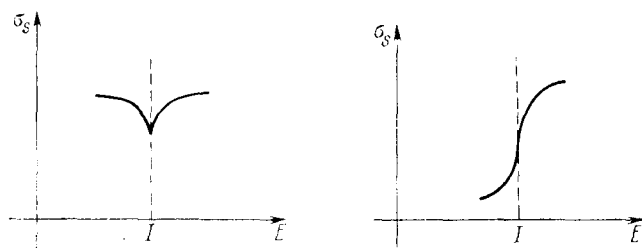


Рис. 43.

плотность падающего потока, находим сечение рождения (поглощения) частиц

$$\sigma = \frac{\pi}{p^2} (1 - |S_0|^2). \quad (4.44)$$

Сравнивая (4.43) и (4.44), получаем:

$$|S_0|_{E>I} = 1 - C_1 \sqrt{E - I},$$

причем $C_1 > 0$.

При $E < I$ неупругих процессов нет, следовательно, $|S_0|_{E<I} = 1$. Оба последних соотношения вблизи порога

можно записать в виде:

$$S_0 = (1 - C_1 \sqrt{E - I}) e^{2i\delta_0}, \quad (4.45)$$

где δ_0 — вещественная фаза.

Действительно, при $E < I$ это выражение дает $|S_0| = 1$ с точностью до членов порядка $(\sqrt{|I - E|})$.

Сечение упругого рассеяния σ_s состоит из суммы двух членов. Первое слагаемое связано с парциальными амплитудами $l \neq 0$; в области порога его можно заменить на константу. Второе слагаемое равно $\frac{\pi}{p^2} |1 - S_0|^2$. Подставляя сюда выражение для S_0 , находим:

$$\sigma_s = \begin{cases} \text{const} + \frac{2\pi \sin^2 \delta_0}{p^2} C_1 \sqrt{E - I}, & E > I, \\ \text{const} + \frac{\pi \sin 2\delta_0}{p^2} C_1 \sqrt{I - E}, & E < I. \end{cases}$$

В зависимости от величины фазы δ_0 могут осуществляться два типа поведения σ_s . Они показаны на рис. 43.

МЕТОДЫ ЗАДАЧИ МНОГИХ ТЕЛ

Решение уравнения Шредингера для системы, состоящей из большого числа сильно взаимодействующих частиц, представляет собой неразрешимую задачу. Даже классическая задача трех тел не решается в общем виде. К счастью, нахождение Ψ -функции такой системы не только неразрешимая, но и ненужная задача. Действительно, такое детальное описание задачи многих тел не диктуется никакими возможными экспериментами. Любая экспериментальная установка содержит сравнительно небольшое число индикаторов частиц и поэтому в случае большого числа частиц, участвующих в процессе, дает только усредненные характеристики. Попытка определить координаты всех частиц такой системы привела бы из-за соотношения неопределенностей к сложному возбужденному состоянию и изменила бы ее свойства. Описание макроскопической системы с помощью волновой функции является неадекватным способом рассмотрения *). Должны быть использованы методы неполного описания, при которых определяются соотношения только между усредненными величинами. Примером такого подхода является гидродинамика, уравнения которой определяют только среднюю скорость частиц в каждой точке (поле скоростей).

Другой более близкий к нашей задаче пример — это кинетическое уравнение, позволяющее найти функцию распределения частиц по скоростям и координатам. Одночастичная функция распределения $f(r, p, t)$, зависящая от координаты r и импульса p частицы, дает возможность вычислять средние значения аддитивных величин, таких,

*) В книге Н. С. Крылова «Работы по обоснованию статистики» эта идея используется для обоснования статистической физики.

как, например, плотность $n(r) = \sum_i \delta(r - r_i)$ или импульс единицы объема $j(r) = \sum_i p_i \delta(r - r_i)$. Двухчастичная функция распределения $f(r_1, r_2; p_1, p_2; t)$ позволяет находить корреляции между координатами и скоростями двух частиц и определять средние от величин, зависящих от координат двух частиц, например, среднее значение энергии парного взаимодействия $V = \sum_{ik} V(r_i - r_k)$. Периодические или слабо затухающие решения уравнения для функции распределения дают собственные частоты системы.

Развиваемый ниже метод функций Грина, как мы увидим, включает этот способ классического описания системы многих частиц и позволяет переводить его на квантовый язык. Однако даже такое неполное описание системы требует использования приближенных методов. Действительно, если интересоваться поведением только, скажем, двух частиц, мы неизменно придем к промежуточным состояниям, в которых в результате взаимодействия участвует несколько частиц, каждая из которых вовлечет в движение еще частицы, и задача сделается неразрешимой без использования приближенных методов.

Наиболее простой случай осуществляется, когда взаимодействие между частицами может считаться малым по сравнению с их средней кинетической энергией и применима теория возмущений. С примером такого рода мы уже сталкивались при использовании метода Томаса — Ферми для нахождения поля в тяжелом атоме. При этом решается уравнение Шредингера для электрона, движущегося в самосогласованном поле остальных частиц, находящихся в основном состоянии. Параметром ζ , характеризующим применимость этого приближения, является отношение энергии взаимодействия двух электронов $\sim Z^{1/3}$ к кинетической энергии электрона $\sim Z^{1/3}$ (стр. 39), т. е. $\zeta \sim 1/Z$. Следующий шаг — это учет влияния квантовых флуктуаций плотности на движение рассматриваемого электрона.

Другой метод приближенного подхода к задаче многих тел возможен в том случае, когда взаимодействие двух частиц не мало, но частицы находятся в среднем далеко

друг от друга настолько, что можно пренебречь случаями тройного взаимодействия частиц. Это так называемое «газовое приближение», которое осуществляется в случае газа сильно взаимодействующих частиц. Параметром ζ этого приближения является величина $fn^{1/3}$, где f — амплитуда рассеяния двух частиц, n — плотность, т. е. $\zeta \sim f/r_0$ (r_0 — среднее расстояние между частицами).

В наиболее интересных физических объектах (металлы, твердое тело, жидкий гелий, атомное ядро) не выполняются условия применимости ни теории возмущений, ни газового приближения. В этих случаях должны быть использованы другие методы рассмотрения. Прежде всего следует выяснить характер наинизших возбужденных состояний системы с определенными интегралами движения, например, в однородной системе, состояний с определенным импульсом. Тогда более сложные возбуждения можно рассматривать как газ таких элементарных возбуждений.

Поясним это на примере задачи о возбужденных состояниях твердого тела. Предположим, что мы имеем дело с диэлектриком. Тогда в слабых возбуждениях электроны не участвуют и все слабо возбужденные состояния сводятся к звуковым волнам. Применение квантовой механики к звуковым колебаниям (т. е. к задаче об осцилляторах) приводит к тому, что энергия волны с заданным волновым вектором p изменяется порциями $\epsilon_n(p) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega$, $\omega = cp$ (c — скорость звука). Роль элементарного возбуждения играет наинизшее возбуждение системы ($n = 1$) с энергией $\omega = \epsilon_1 - \epsilon_0$ и импульсом p . Любые слабо возбужденные состояния системы можно рассматривать как газ этих элементарных возбуждений (фононов). Нелинейные слагаемые в уравнениях упругости соответствуют взаимодействию между фононами. Такие элементарные возбуждения можно назвать квазичастицами. Для электромагнитного поля такой квазичастицей является фотон.

Итак, метод изучения систем сильно взаимодействующих частиц состоит в том, что в качестве объекта рассмотрения берутся не частицы, входящие в состав системы, а квазичастицы, для которых можно использовать газовое приближение, поскольку при слабых возбуждениях их количество невелико.

Ниже мы увидим, что низколежащие возбужденные состояния ферми-систем даже при сильном взаимодействии имеют очень простую природу. Прежде всего, существуют так называемые одночастичные возбуждения, которые аналогичны возбуждениям в идеальном ферми-газе.

Возбужденные состояния идеального ферми-газа соответствуют переходу частицы из состояния с энергией, меньшей чем граница Ферми, в свободное состояние выше границы Ферми, или, иначе, появлению частицы и дырки на фоне фермиевского заполнения.

Возбуждения в реальной ферми-системе также соответствуют появлению частиц и дырок, но со свойствами, отличающимися от свойств свободных частиц и дырок. В частности, такие квазичастицы имеют массу, отличающуюся от массы свободных частиц. Иными словами, одночастичные возбуждения в реальной ферми-системе совпадают с возбуждениями идеального газа, составленного из квазичастиц с фермиевским распределением по энергии.

Физически эти результаты очень естественны. Частица, двигаясь в среде, увлекает в движение прилегающие к ней частицы. При слабых возбуждениях, когда энергия частицы близка к энергии Ферми, характер распределения вовлеченных в движение частиц мало зависит от состояния рассматриваемой частицы. Поэтому в случае слабых возбуждений частица и ее окружение выступают как стабильное образование, которое и называется квазичастицей. Поскольку спин сохраняется, спин всего конгломерата, образующего квазичастицу, такой же, как и спин частицы. Следовательно, когда квазичастицы выступают как целое, они должны подчиняться статистике Паули, как любая частица со спином $1/2$.

Итак, во всех случаях, когда участвует малое число квазичастиц и квазидырок, они ведут себя как возбуждения в идеальном ферми-газе.

В бесконечной системе для определения спектра одночастичных возбуждений достаточно ввести одну невычисляемую константу — эффективную массу квазичастиц.

В конечной системе для характеристики одночастичных возбуждений приходится вводить, помимо эффективной массы квазичастиц, еще параметры эффективной потенциальной ямы, в которой движутся квазичастицы. Для систем с короткодействующими силами радиуса r_0

к таким параметрам относятся глубина, размеры и форма ямы, а также ширина слоя δ ($\delta \sim r_0$), на котором плотность переходит от своего значения внутри системы к нулю.

Помимо одночастичных возбуждений, в системе взаимодействующих частиц существуют так называемые коллективные возбуждения, которые можно интерпретировать как связанные состояния квазичастицы и квазидырки. Примером таких возбуждений могут служить звуковые волны в бесконечной системе. Для определения спектра коллективных возбуждений следует ввести взаимодействие между квазичастицами, которое, как мы увидим, сильно отличается от взаимодействия двух свободных частиц.

Для большинства физических приложений (интенсивности переходов, магнитные и квадрупольные моменты и т. д.) необходимо знать изменения, происходящие в системе под влиянием внешнего поля. Как показывает теория, задача определения реакции системы на внешнее поле сводится к задаче о поведении во внешнем поле газа взаимодействующих квазичастиц, помещенных в потенциальную яму. При этом достаточно учитывать только парные соударения квазичастиц. Многократные соударения частиц учитываются теорией точно, но приводят только к изменению взаимодействия между квазичастицами и к изменению «заряда» для взаимодействия квазичастиц с внешним полем. «Заряд» во многих случаях удается найти из общих соображений (из законов сохранения заряда, энергии, импульса и т. д.).

Эти результаты также имеют очень простое и наглядное объяснение. Пусть на систему действует не очень сильное поле, такое, что изменение энергии каждой частицы в этом поле мало по сравнению с ее кинетической энергией. Тогда состояние системы соответствует появлению нескольких квазичастиц и нескольких квазидырок на фоне фермиевского распределения. Число возникших квазичастиц составляет малую долю от полного числа частиц в системе. Если среднее расстояние между частицами порядка радиуса действия сил, то среднее расстояние между квазичастицами будет значительно больше, чем радиус сил взаимодействия, и следовательно, квазичастицы образуют газ, т. е. можно пренебречь случаями,

когда одновременно сталкиваются три или больше ква-
зичастиц.

Что касается «заряда» квазичастицы по отношению к внешнему полю, то этот «заряд» описывает взаимодействие с полем того конгломерата частиц, который образует квазичастицу. Допустим, к ядру приложено электрическое поле, которое действует только на протоны. Так как при взаимодействии протона с остальными частицами ядра заряд сохраняется, то весь конгломерат, образующий протонную квазичастицу, имеет тот же заряд, что и протон. В этом случае заряд квазичастицы равен заряду частицы. В случае других внешних полей, например для магнитного поля, взаимодействие квазичастицы с полем отличается от соответствующей величины для частицы. Движущийся нейтрон в пустоте взаимодействует с магнитным полем только за счет своего внутреннего магнитного момента, тогда как нейтронная квазичастица при своем движении вовлекает в движение также и протоны, в результате чего возникает электрический ток и взаимодействие с магнитным полем изменяется. У нейтронных квазичастиц возникает орбитальный магнетизм, т. е. магнетизм, связанный с их движением по орбите. В отсутствие взаимодействия орбитальный магнетизм есть только у протонов. Для бесконечной однородной ферми-системы описанная выше теория взаимодействующих квазичастиц была построена Ландау (1958 г.).

Метод квазичастиц в применении к теории ядра состоит в следующем. Прежде всего доказывается, что для слабых возбуждений ядро можно рассматривать как газ квазичастиц в потенциальной яме. Взаимодействие между квазичастицами характеризуется несколькими универсальными константами. Это взаимодействие не мало и должно точно учитываться. Единственное приближение состоит в том, что для слабых возбуждений, когда число квазичастиц мало, учитываются только их парные соударения. Для большинства наблюдаемых ядерных явлений можно получить формулы, которые в результате решения уравнений на счетных машинах выражаются через универсальные константы теории.

Константы, определяющие взаимодействие квазичастиц так же, как и параметры потенциальной ямы, не могут быть вычислены без предположения о малости

взаимодействия между частицами. В случае ядра взаимодействие между частицами не может считаться малым, поэтому эти константы должны быть найдены из сравнения теории с экспериментом.

Для проведения описанного выше метода квазичастиц наиболее эффективным средством являются функции Грина и графическое описание процессов. Эта техника будет ниже пояснена на простых примерах и затем использована для решения различных задач.

Идея графического метода в нашем изложении состоит в том, что процессы описываются рисунками, изображающими пространственно-временной ход процесса, а затем на простых примерах устанавливается соответствие между элементами графиков и аналитическими выражениями, что позволяет расшифровать любые графики, состоящие из этих элементов. Такой способ, помимо его простоты, дает возможность подчеркнуть качественную сторону расчетов *).

1. МЕТОД КВАЗИЧАСТИЦ И ФУНКЦИИ ГРИНА

Амплитуды перехода. Для количественного проведения метода квазичастиц достаточно получить уравнение для небольшого числа частиц, участвующих в изучаемом явлении, тогда как уравнение Шредингера описывает поведение всей системы и приводит к неразрешимым трудностям. Для такого неполного описания системы удобно перейти от Ψ -функций к амплитудам перехода (функции Грина). В отличие от Ψ -функции системы, которая зависит от координат всех частиц, амплитуда перехода есть функция только координат частиц начального и конечного состояний. Рассмотрим сначала пример одной частицы. Вместо уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - H \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

*) Более формальное изложение этих вопросов читатель может найти в книгах: А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, 1962; А. Б. Мигдал, Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, «Наука», 1965; А. Б. Мигдал, Метод квазичастиц в теории ядра, «Наука», 1967.

можно пользоваться уравнением для функции Грина $G(r, t; r', t')$

$$i \frac{\partial G}{\partial t} - HG = i\delta(r - r')\delta(t - t'). \quad (5.1)$$

Функция Грина имеет смысл амплитуды перехода частицы из точки r' в момент t' в точку r в момент t . Квадрат модуля амплитуды дает вероятность перехода.

В этом легко убедиться, выразив с помощью функции Грина Ψ -функцию в момент времени $t + \tau$ через Ψ -функцию в момент t

$$\Psi(r, t + \tau) = \int G(r, t + \tau; r', t) \Psi(r', t) dr'. \quad (5.2)$$

Действительно, как можно видеть из (5.2), $\Psi(r, t + \tau)$ удовлетворяет уравнению Шредингера и, кроме того, если $G(r, t + 0; r', t) = \delta(r - r')$, переходит при $\tau \rightarrow 0$ в $\Psi(r, t)$.

Формула (5.2) содержит G только для $\tau > 0$. Положим $G = 0$ при $\tau < 0$. Тогда из (5.1) получаем

$$G(r, t + 0; r', t) = \delta(r - r'),$$

что и требуется для (5.2). В отсутствие внешнего поля из соображений симметрии, т. е. из однородности и изотропии пространства и однородности времени, следует, что

$$G(r, t; r', t') = G(|r - r'|, t' - t).$$

Пусть система собственных функций определяется соотношениями

$$H\phi_\lambda(r) = \epsilon_\lambda\phi_\lambda(r), \quad H = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

Примерный вид потенциальной ямы V для нуклона, движущегося в ядре, дан на рис. 44, где R — радиус ядра, r_0 — ширина «диффузной области», т. е. той области, на которой V переходит от постоянного значения внутри к значению вне ядра.

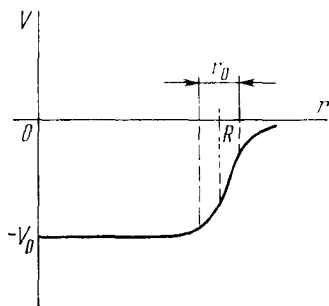


Рис. 44.

Представим Ψ -функцию частицы в виде $\Psi(r, t) = \sum_{\lambda} C_{\lambda}(t) \varphi_{\lambda}(r)$, тогда соотношение (5.2) примет вид

$$C_{\lambda}(t + \tau) = \sum_{\lambda'} G_{\lambda\lambda'}(\tau) C_{\lambda'}(t),$$

$$G_{\lambda\lambda'} = \int d^3r d^3r' G(r, r', \tau) \varphi_{\lambda}^*(r) \varphi_{\lambda'}(r').$$

Так как φ_{λ} — собственная функция, то переходы в другие состояния не происходят и $C_{\lambda}(t + \tau) = e^{-i\varepsilon_{\lambda}\tau} C_{\lambda}(t)$, т. е.

$$G_{\lambda\lambda'}(\tau) = G_{\lambda}(\tau) \delta_{\lambda\lambda'} = e^{-i\varepsilon_{\lambda}\tau} \delta_{\lambda\lambda'} \theta(\tau), \quad (5.3)$$

где $\theta(\tau) = \begin{cases} 1, & \tau > 0, \\ 0, & \tau < 0. \end{cases}$

Этот же результат можно без труда получить и непосредственно из уравнения для G .

Переходя к фурье-представлению по τ , получим

$$G_{\lambda}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\lambda} + i\delta}, \quad \delta = +0. \quad (5.4)$$

Здесь $G_{\lambda}(\varepsilon)$ определено соотношением

$$G_{\lambda}(\varepsilon) = \frac{1}{i} \int G_{\lambda}(\tau) e^{i\varepsilon\tau} d\tau.$$

Поэтому в обращенном преобразовании имеем

$$G_{\lambda}(\tau) = \int e^{-i\varepsilon\tau} G_{\lambda}(\varepsilon) \frac{i d\varepsilon}{2\pi}.$$

Знак δ выбран так, чтобы $G_{\lambda}(\tau) = 0$ при $\tau < 0$. В правильности знака δ легко убедиться, переходя обратно в τ -представление

$$G_{\lambda}(\tau) = \int \frac{e^{-i\varepsilon\tau}}{\varepsilon - \varepsilon_{\lambda} + i\delta} \frac{i d\varepsilon}{2\pi}$$

и сдвигая контур интегрирования в верхнюю полуплоскость (ε) аналогично тому, как это было сделано на стр. 77.

В смешанном представлении (r, ε) получаем

$$\begin{aligned} G(r, r', \varepsilon) &= \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} G_{\lambda\lambda'}(\varepsilon) \varphi_{\lambda}(r) \varphi_{\lambda'}^*(r') = \sum_{\lambda} \frac{\varphi_{\lambda}(r) \varphi_{\lambda}^*(r')}{\varepsilon - \varepsilon_{\lambda} + i\delta}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

В сумму по λ входит суммирование по связанным состояниям и интегрирование по сплошному спектру. Функция $G(r, r', \varepsilon)$ имеет полюса при значениях ε , равных энергиям ε_λ связанных состояний.

Функция Грина просто связана с S -матрицей задачи рассеяния на потенциале $V(r)$, введенной на стр. 181.

Если в начальный момент $t \rightarrow -\infty$ Ψ -функция в импульсном представлении имела вид $C_p = e^{-iE_p t}$, а в момент $t' \rightarrow +\infty$ принимает вид $\sum_{p'} C_{p'}^{(p)} e^{-iE_{p'} t'}$, то матричный элемент S -матрицы $S_{pp'} = C_{p'}^{(p)}$. С другой стороны, из (5.2) получаем

$$C_{p'}^{(p)} = G(p', p, t', t) e^{iE_{p'} t' - iE_p t} = S_{pp'}.$$

$t \rightarrow -\infty, t' \rightarrow \infty$

Из выражений, связывающих S -матрицу с амплитудой рассеяния (стр. 182), следует

$$e^{iE_{p'} t' - iE_p t} G(p', p, t', t) = -2\pi i \delta(E_p - E_{p'}) A(p, p'),$$

$t \rightarrow -\infty, t' \rightarrow \infty$

где $A(p, p')$ — амплитуда рассеяния в энергетической нормировке, связанная с обычной амплитудой $f(p', p)$ соотношением

$$f(p', p) = -\frac{m}{2\pi} A(p', p). \quad (5.6)$$

Одночастичные функции Грина в системе невзаимодействующих частиц (функции Грина квазичастиц). Найдем функцию Грина частицы $G_{\lambda\lambda'}(\tau)$, т. е. амплитуду перехода из состояния с одной частицей λ в состояние с одной частицей λ' в системе невзаимодействующих частиц. Для этого нужно только в (5.3) учесть принцип Паули — должны быть исключены переходы в занятые состояния. (Мы для простоты рассматриваем здесь только случай ферми-частиц.) Поэтому в функцию Грина должен быть включен множитель $1 - n_\lambda$, где

$$n_\lambda = \begin{cases} 1, & \varepsilon_\lambda < \varepsilon_F \\ 0, & \varepsilon_\lambda > \varepsilon_F \end{cases} \text{ — число частиц в состоянии } \lambda.$$

Таким образом, получаем

$$G_{\lambda\lambda'}^+(\tau) = (1 - n_\lambda) \delta_{\lambda\lambda'} \begin{cases} e^{-i\varepsilon_\lambda \tau}, & \tau > 0, \\ 0, & \tau < 0. \end{cases} \quad (5.7)$$

Найдем теперь выражение для амплитуды перехода дырки. Так как число дырочных мест на уровне λ пропорционально n_λ , то аналогично случаю частицы получаем

$$G_{\lambda\lambda'}^-(\tau) = n_\lambda \delta_{\lambda\lambda'} \begin{cases} e^{-i\varepsilon_\lambda^- \tau}, & \tau > 0, \\ 0, & \tau < 0. \end{cases} \quad (5.8)$$

Здесь ε_λ^- — энергия дырки, или, точнее, разность энергий системы после и до появления дырки.

Во многих случаях удобно ввести функцию Грина частицы $G_\lambda(\tau)$, определенную как для $\tau > 0$, так и для $\tau < 0$, и объединяющую выражения (5.7) и (5.8):

$$G_\lambda(\tau) = \begin{cases} G_\lambda^+(\tau), & \tau > 0, \\ -G_\lambda^-(-\tau), & \tau < 0. \end{cases} \quad (5.9)$$

В фурье-представлении по τ формулы (5.7), (5.8) и (5.9) принимают вид

$$\begin{aligned} G_\lambda^+(\varepsilon) &= \frac{1 - n_\lambda}{\varepsilon - \varepsilon_\lambda + i\delta}, \\ G_\lambda^-(\varepsilon) &= -\frac{n_\lambda}{\varepsilon - \varepsilon_\lambda^- + i\delta}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$G_\lambda(\varepsilon) = G_\lambda^+(\varepsilon) - G_\lambda^-(-\varepsilon) = \left[\frac{1 - n_\lambda}{\varepsilon - \varepsilon_\lambda + i\delta} + \frac{n_\lambda}{\varepsilon + \varepsilon_\lambda^- - i\delta} \right].$$

Из (5.10) вытекает важное свойство функций Грина G^+ и G^- — каждая из них имеет полюс при значении ε , равном энергии частицы и дырки соответственно.

Из сказанного во введении следует, что такой же вид имеет и функция Грина квазичастицы (квазидырки) в системе взаимодействующих частиц — нужно только заменить энергию частицы (дырки) на энергию квазичастицы (квазидырки).

На стр. 232 мы поясним исходные формулы (5.7) и (5.8) для ферми-систем и получим аналогичные выражения для бозе-частиц.

Для основного состояния, когда

$$n_{\lambda} = \begin{cases} 1 & \text{при } \varepsilon_{\lambda} < \varepsilon_F, \\ 0 & \text{при } \varepsilon_{\lambda} > \varepsilon_F, \end{cases}$$

последняя из формул (5.10) может быть записана в виде:

$$G_{\lambda}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\lambda} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon - \varepsilon_F)}. \quad (5.10')$$

Функции Грина в системе взаимодействующих частиц.

Мы нашли функцию Грина свободной частицы и функцию Грина одной частицы в системе невзаимодействующих ферми-частиц, находящейся в основном состоянии. Можно было бы легко найти и функцию Грина, описывающую поведение двух или большего количества частиц или дырок в системе невзаимодействующих частиц. Однако нашей задачей является учет взаимодействия между частицами. Основная идея метода функций Грина состоит в том, что для изучения системы многих частиц нет нужды вводить функции Грина с очень большим числом частиц. Соотношение (5.1) легко обобщается на случай многих частиц (для этого достаточно под r понимать всю совокупность координат всех частиц). Однако нахождение такой функции Грина $G(r_1, \dots, r_N; t; r'_1, \dots, r'_N; t')$ столь же невозможно в системе многих тел, как и нахождение Ψ -функции. В тех случаях, когда в рассматриваемой задаче эффективно участвует небольшое число частиц, незначит рассматривать все частицы системы.

Почти все экспериментально изучаемые процессы, происходящие в системе многих тел, как мы увидим, описываются одночастичной и двухчастичной функциями Грина.

Функцию Грина одной частицы в системе взаимодействующих частиц определим выражением

$$G^+(r, t; r', t') = (\Phi_0 \Psi(r', t') \Psi^+(r, t) \Phi_0), \quad (5.11)$$

$t > t'$

где Φ_0 — точная собственная функция основного состояния; $\Psi(r, t)$ — оператор вторичного квантования в гейзенберговском представлении, т. е.

$$\Psi(r, t) = e^{iHt} \Psi(r) e^{-iHt},$$

где H — гамильтонов оператор системы с учетом взаимо-

действия, а оператор $\Psi(\mathbf{r})$ может быть выражен через операторы уничтожения частицы в каком-либо состоянии $\phi_\lambda(\mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} a_{\lambda} \phi_{\lambda}(\mathbf{r}).$$

Ниже мы убедимся, что выражение (5.11) имеет простой смысл и действительно дает амплитуду перехода частицы из состояния $(\mathbf{r}', t')$ в состояние $(\mathbf{r}, t)$. Квадрат модуля этой величины дает соответствующую вероятность. Аналогичная формула может быть написана для функции Грина дырки

$$G^-(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = (\Phi_0 \Psi^+_{t > t'}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}', t') \Phi_0). \quad (5.12)$$

Уничтожение частицы эквивалентно рождению дырки. Оба выражения определены только для $t > t'$. Их можно формально объединить в одну функцию Грина, описывающую при $\tau > 0$ частицу, а при $\tau < 0$ дырку, так же, как это было сделано для системы свободных частиц (стр. 216):

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \begin{cases} G^+(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'), & t > t', \\ \pm G^-(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t), & t < t'. \end{cases} \quad (5.13)$$

Знак «плюс» соответствует бозе-, а знак «минус» — ферми-частицам.

Выражения (5.11) и (5.12) в случае невзаимодействующих частиц, как нетрудно видеть, переходят в соответствующие формулы предыдущего раздела. Рекомендуем читателю проделать это вычисление.

Соотношения (5.11) и (5.12) можно записать в виде

$$G(x, x') = \langle T \Psi(x) \Psi^+(x') \rangle,$$

где через $\langle \dots \rangle$ обозначено усреднение по основному состоянию, $x = (\mathbf{r}, t)$, оператор T (оператор упорядочения во времени) означает, что величины, стоящие справа от T , располагаются в порядке убывания времени в аргументах. Для ферми-систем при $t' > t$ (когда Ψ и Ψ^+ меняются местами) ставится знак «—».

Аналогичным образом определяются и двухчастичные функции Грина: вместо $\Psi(1)\Psi^+(2)$ входят произведения

$\Psi(1) \Psi(2) \Psi^+(3) \Psi^+(4)$. Ниже мы увидим, как вычисляются функции Грина частиц и как они связаны с функциями Грина квазичастиц.

Аналитические свойства одночастичной функции Грина. Ограничимся для простоты случаем бесконечной однородной системы. Тогда, в силу однородности и изотропии системы и однородности времени, имеем

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, t - t'). \quad (5.14)$$

Перейдем к фурье-представлению по $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Из (5.11) и (5.12) получаем для

$$G(\mathbf{p}, \tau) = \int d^3r_1 G(\mathbf{r}_1, \tau) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}_1}$$

выражение

$$G(\mathbf{p}, \tau) = \begin{cases} \langle a_{\mathbf{p}} e^{-iH\tau} a_{\mathbf{p}}^+ \rangle e^{iE_0\tau} & \text{при } \tau > 0, \\ \pm \langle a_{\mathbf{p}}^+ e^{iH\tau} a_{\mathbf{p}} \rangle e^{-iE_0\tau} & \text{при } \tau < 0. \end{cases} \quad (5.15)$$

Записывая операторы, входящие в $G(\mathbf{p}, \tau)$, в энергетическом представлении, имеем:

$$G(\mathbf{p}, \tau) = \begin{cases} \sum_s |(a_{\mathbf{p}}^+)_{s0}|^2 \exp\{-i(E_s - E_0)\tau\} & \text{при } \tau > 0, \\ \pm \sum_s |(a_{\mathbf{p}})_{s0}|^2 \exp\{i(E_s - E_0)\tau\} & \text{при } \tau < 0. \end{cases} \quad (5.16)$$

Так как оператор $a_{\mathbf{p}}^+$ увеличивает импульс системы на величину $\mathbf{p}$, а число частиц в системе — на 1, то суммирование при $\tau > 0$ производится по всем состояниям с импульсом $\mathbf{p}$ и числом частиц $N + 1$, если в основном состоянии число частиц было N , а импульс равнялся нулю. Аналогично этому суммирование при $\tau < 0$ производится по состояниям с числом частиц $N - 1$ и импульсом $-\mathbf{p}$.

Обозначим

$$\begin{aligned} E_s(N + 1) - E_0(N) = \\ = \varepsilon_s(N + 1) + E_0(N + 1) - E_0(N) = \varepsilon_s + \mu, \end{aligned}$$

где $\mu = E_0(N + 1) - E_0(N)$ — химический потенциал. Энергия возбуждения $\varepsilon_s = E_s(N + 1) - E_0(N + 1)$ по определению положительна.

Аналогично,

$$\begin{aligned} E_s (N - 1) - E_0 (N) &= \\ &= \varepsilon_s (N - 1) - E_0 (N) + E_0 (N - 1) = \varepsilon'_s - \mu'. \end{aligned}$$

Величины ε'_s и μ' совпадают с ε_s и μ с точностью $1/N$.

Введем функции

$$A(\mathbf{p}, E) dE = \sum_s |(a_{\mathbf{p}}^+)_{s0}|^2, \quad E \leq \varepsilon_s \leq E + dE, \quad (5.17)$$

$$B(\mathbf{p}, E) dE = \sum_s |(a_{\mathbf{p}})_{s0}|^2, \quad E \leq \varepsilon_s \leq E + dE$$

и перейдем в выражении (5.16) к разложению Фурье по τ . Имеем

$$G(\mathbf{p}, \varepsilon) = - \int_0^\infty dE \left\{ \frac{A(\mathbf{p}, E)}{E - \varepsilon + \mu - i\delta} \mp \frac{B(\mathbf{p}, E)}{E + \varepsilon - \mu - i\delta} \right\}. \quad (5.18)$$

Формула (5.18) представляет собой спектральное разложение для одночастичной функции Грина системы, состоящей из конечного числа ферми-частиц *). Эта формула позволяет получить соотношение, связывающее вещественную и мнимую части функции $G(\mathbf{p}, \varepsilon)$. Действительно, из равенства

$$\frac{1}{E - \varepsilon + \mu - i\delta} = P \frac{1}{E - \varepsilon + \mu} + i\pi\delta(E - \varepsilon + \mu)$$

вытекает

$$\text{Im } G(\mathbf{p}, \varepsilon) = \pi \begin{cases} -A(\mathbf{p}, \varepsilon - \mu), & \varepsilon > \mu, \\ \mp B(\mathbf{p}, \mu - \varepsilon), & \varepsilon < \mu. \end{cases} \quad (5.19)$$

Таким образом, мнимая часть $G(\mathbf{p}, \varepsilon)$ для ферми-частиц изменяет знак в точке $\varepsilon = \mu$, а для бозе-частиц отрицательна для всех $\mathbf{p}$ и ε . Используя (5.18) и (5.19), нетрудно получить

$$G(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G(\mathbf{p}, \varepsilon') d\varepsilon'}{\varepsilon' - \varepsilon - i\delta}. \quad (5.20)$$

Эта формула аналогична соотношению (4.5) на стр. 178.

*) Аналогичное разложение в квантовой теории поля было получено Леманом в 1954 г.

Установим связь одночастичной функции Грина со спектром возбуждений. Функция $G(p, \tau)$ имеет простой физический смысл. Пусть в начальный момент система находится в состоянии $\Phi(0) = a_p^+ \Phi_0$, где Φ_0 — основное состояние системы N частиц (физический «вакуум»). В момент $\tau > 0$ волновая функция системы равна

$$\Phi(\tau) = e^{-iH\tau} a_p^+ \Phi_0.$$

Функция $G(p, \tau)$ равна амплитуде вероятности найти систему в момент τ в состоянии $\Phi(0)$. Действительно,

$$(\Phi(0), \Phi(\tau)) = (\Phi_0 a_p e^{-iH\tau} a_p^+ \Phi_0) = G(p, \tau). \quad (5.21)$$

Аналогичное соотношение существует для $\tau < 0$. Согласно (5.16) и (5.18) для $\tau > 0$

$$(\Phi(0), \Phi(\tau)) = e^{-i\mu\tau} \int_0^\infty A(p, E) e^{-iE\tau} dE. \quad (5.22)$$

При отсутствии взаимодействия для p , больших p_F ($\mu = \varepsilon_F$),

$A(p, E) = \delta(E + \varepsilon_F - \varepsilon^0(p))$ и $(\Phi(0), \Phi(\tau)) = e^{-i\varepsilon^0(p)\tau}$.

При включении взаимодействия между частицами δ -функция в $A(p, E)$ заменяется на функцию, имеющую резкий максимум вблизи $E = \varepsilon(p) - \mu$, где $\varepsilon(p)$ — энергия квазичастиц.

Рассмотрим поведение функции Грина для больших положительных времен. Пусть ближайшая к вещественной оси особая точка аналитического продолжения $A(p, E)$ в нижнюю полуплоскость есть полюс первого порядка при значении $E = \varepsilon(p) - \mu - i\gamma$. Тогда, смещая в (5.22) контур интегрирования в нижнюю полуплоскость, получим

$$G(p, \tau) = e^{-i\mu\tau} \int_C A e^{-iE\tau} dE. \quad (5.22')$$

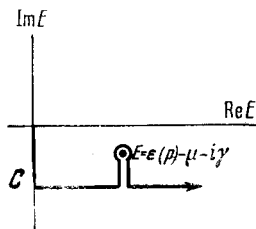


Рис. 45.

Контур интегрирования C изображен на рис. 45. Неэкспоненциальное слагаемое в функции $G(p, \tau)$, возника-

ющее от интегрирования по мнимой оси вблизи $E = 0$, для $\tau \geq 1/\gamma$ имеет порядок величины $(\gamma/\varepsilon(p))^2$. Таким образом,

$$G(p, \tau) = Ze^{-i\varepsilon(p)\tau - \gamma\tau} + O[(\gamma/\varepsilon(p))^2]. \quad (5.23)$$

Этот результат можно интерпретировать следующим образом: в состоянии $\Phi(0)$ с амплитудой Z присутствует пакет, изображающий квазичастицу с энергией $\varepsilon(p)$ и затуханием γ . Значения $\varepsilon(p)$ и γ определяются положением полюса $A(p, E)$.

Рассматривая $\tau < 0$, мы пришли бы к аналогичному соотношению для квазидырки. Таким образом, $G(p, \varepsilon)$ может быть записана в виде

$$G(p, \varepsilon) = Z \left[\frac{1 - n_p}{\varepsilon - \varepsilon(p) + i\delta} + \frac{n_p}{\varepsilon - \varepsilon(p) - i\delta} \right] + G_{\text{Reg}} \equiv \\ \equiv ZG_Q + G_{\text{Reg}}, \quad (5.24)$$

где G_Q — функция Грина квазичастицы.

Этим соотношением устанавливается связь между функциями Грина частицы и квазичастицы.

Вычисление наблюдаемых величин. С помощью функции G можно вычислять средние значения по основному состоянию операторов вида однократной суммы по всем частицам (ξ_i — совокупность пространственных и спиновой переменных):

$$A = \sum_i A_i(\xi_i, p_i), \quad (5.25)$$

т. е. таких, как например, плотность частиц в точке r , равная

$$n(r) = \sum_i \delta(r - r_i),$$

или полный орбитальный момент

$$L = \sum_i [r_i \times p_i].$$

Действительно, оператор A во вторичном квантовании имеет вид

$$A = \int \Psi^+(\xi) A(\xi, p) \Psi(\xi) d\xi, \quad (5.25')$$

поэтому его среднее значение по основному состоянию системы выражается через G при $t = t' = 0$:

$$G(\xi, \xi', \tau) = \overline{\mp}(\Phi_0 \Psi^+(\xi') \Psi(\xi) \Phi_0)_{\tau \rightarrow -0} \quad (5.26)$$

(Φ_0 , как и выше, означает точное основное состояние).

Среднее значение оператора A будет равно

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \overline{\mp} \int \{A(\xi, p) G(\xi, \xi', (\tau = -0))\}_{\xi'=\xi} d\xi \equiv \\ &\equiv \overline{\mp} \text{Sp } AG_{\tau=-0}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Таким образом, $G_{\tau \rightarrow -0}$ совпадает с точностью до множителя ± 1 с матрицей плотности. Для ферми-частиц

$$\rho(\xi', \xi) = (\Phi_0 \Psi^+(\xi') \Psi(\xi) \Phi_0) = -G_{\tau=-0}; \quad (5.28)$$

для бозе-частиц

$$\rho(\xi', \xi) = G_{\tau \rightarrow -0}. \quad (5.28')$$

Для определения средних значений операторов вида

$$B = \sum_{i, k} B_{ik}(\xi_i, p_i; \xi_k, p_k), \quad (5.29)$$

таких, как, например, энергия взаимодействия частиц, необходимо знание двухчастичной функции Грина. Эта величина определяется аналогично G

$$G_2(1, 2; 3, 4) = (\Phi_0 T \Psi(1) \Psi(2) \Psi^+(3) \Psi^+(4) \Phi_0). \quad (5.30)$$

Оператор T означает, что все величины, стоящие справа от T , располагаются в порядке убывания времен в аргументах Ψ, Ψ^+ ; перед всем выражением ставится знак «+» или «-» (для ферми-систем) в зависимости от того, четной или нечетной перестановкой получается упорядоченное выражение из написанного в (5.30). Функция G_2 дает амплитуду перехода для случая, когда начальное и конечное состояния соответствуют в зависимости от соотношения времен t_1, t_2, t_3, t_4 либо двум частицам, либо двум дыркам, либо частице с дыркой. В G_2 также содержатся случаи, когда в начальный момент есть частица, а конечное состояние соответствует двум частицам и дырке. Мы для краткости говорим о двух частицах (дырках), подразумевая, что остальные $N - 2$ частиц в начальный и конечный моменты находятся в основном состоянии. Функции G и G_2 содержат также ин-

формацию об амплитуде рассеяния в поле рассеивающего центра, помещенного в среду, и об амплитуде рассеяния двух взаимодействующих частиц. Рассеяние двух частиц в среде определяется функцией $G_2(p_1 t_1, p_2 t_2; p_3 t_3, p_4 t_4)$ при $t_1, t_2 \rightarrow -\infty$ и $t_3, t_4 \rightarrow +\infty$ (см. стр. 215). При удалении начальных времен t_1, t_2 от времен взаимодействия волновые пакеты, изображающие частицы с импульсами p_1 и p_2 , затухают так, что ко времени соударения остаются только слагаемые, соответствующие квазичастицам с теми же импульсами (стр. 222). После периода взаимодействия при $t_3, t_4 \rightarrow +\infty$ также останутся только квазичастицы с импульсами p_3 и p_4 . Поэтому задачу рассеяния удобнее рассматривать сразу же в терминах квазичастиц. То же относится к задаче рассеяния в поле рассеивающего центра.

Одночастичная и двухчастичная функции Грина содержат наиболее существенную информацию о системе. Иногда возникают вопросы, требующие знания трехчастичной или четырехчастичной функции Грина. Они могут понадобиться, например, для вычисления энергии связи в системе с непарным взаимодействием.

Распределение ферми-частиц по импульсам. Из формулы (5.26) следует, что распределение частиц по импульсам выражается через функцию Грина

$$n(p) = - \lim_{\tau \rightarrow -0} \int G(p, \varepsilon) e^{-i\varepsilon\tau} \frac{i d\varepsilon}{2\pi}. \quad (5.31)$$

В этом выражении нельзя перейти к пределу $\tau = 0$. Действительно, как видно из (5.24), $G \sim 1/\varepsilon$ при $\varepsilon \rightarrow \infty$ и $\int G(p, \varepsilon) d\varepsilon$ по вещественной оси расходится. При конечном отрицательном τ можно заменить интеграл по вещественной оси на интеграл по замкнутому контуру C , состоящему из вещественной оси и бесконечной полуокружности в верхней полуплоскости, после чего положить $\tau = 0$. Таким образом,

$$n(p) = - \int_C G(p, \varepsilon) \frac{i d\varepsilon}{2\pi}.$$

Как мы видели, функция Грина имеет полюс в точке $\varepsilon = \varepsilon(p) - i\gamma$

$$G(p, \varepsilon) = \frac{Z}{\varepsilon - \varepsilon(p) + i\gamma(p)} + G_{\text{Reg}}(p, \varepsilon),$$

где $G_{\text{Reg}}(p, \varepsilon)$ — функция, регулярная вблизи полюса. Затухание $\gamma(p)$ изменяет знак при $p = p_F$; $\gamma > 0$ при $p > p_F$; $\gamma < 0$ при $p < p_F$. Поэтому при $p < p_F$ внутри контура C есть полюс, а при $p > p_F$ он переходит в нижнюю полуплоскость, т. е. исключается из интеграла по контуру C . Поэтому

$$n(p_F - 0) - n(p_F + 0) = Z.$$

Так как $0 \leq n(p) \leq 1$, то перенормировка функции Грина (так называется множитель Z) $0 < Z \leq 1$. Распределение частиц по импульсам изображено на рис. 46 (Мигдал, 1957).

Таким образом, изучение аналитических свойств функции Грина позволило получить важный физический результат. Несмотря на взаимодействие между частицами, которое разбрасывает частицы по импульсам, от распределения Ферми свободных частиц остается «воспоминание» в виде обрыва в функции $n(p)$. На рис. 46 показано также распределение квазичастиц. Разумеется, это распределение имеет смысл только для p , близких к p_F , где применимо понятие квазичастицы.

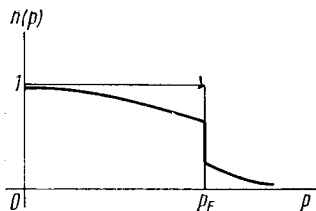
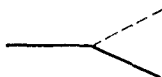


Рис. 46.

2. ГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОД

Графическое изображение процессов. Для получения различных соотношений в задаче многих тел и в теории поля широко используется метод графиков Фейнмана, состоящий в том, что все изучаемые процессы изображаются рисунками, которые заменяют собой громоздкие аналитические выражения, подобно тому, как китайские иероглифы заменяют целые фразы. Начнем с того, что будем изображать различные физические процессы с помощью рисунков, например, движение кванта света изображать пунктиром, а движение свободной частицы — сплошной линией.

График



означает, что заряженная частица, допустим, электрон, испустила квант света. Сплошная линия нарисована с изломом, чтобы показать, что электрон после испускания кванта приобретает другой импульс.

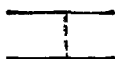
Пусть есть две невзаимодействующие частицы



Если они взаимодействуют, рисуют такую картину:



Если их взаимодействие осуществляется с помощью кванта света (это значит, что взаимодействие кулоновское), тогда линии соединяют пунктирной линией;



Если это два нуклона и взаимодействие осуществляется передачей π -мезона, тогда рисуют волнообразную линию между линиями частиц:



Этот график показывает, что два нуклона один раз взаимодействовали между собой. Если они взаимодействовали два раза, то рисуют так:



График



изображает более сложный процесс: нуклон испустил π -мезон, который затем распался на нуклон и антинуклон.

Эти две частицы превращаются опять в π -мезон, который поглощается вторым нуклоном.

Аналогично можно изобразить и более сложные процессы, происходящие с частицами. Для того чтобы эти рисунки имели не только иллюстративный, но и количественный смысл, будем понимать под каждым графиком амплитуду перехода из одного состояния в начальный момент в другое состояние в конечный момент времени. Квадрат модуля амплитуды перехода дает вероятность нахождения конечного состояния в конечный момент времени. Так, например, приведенный выше график испускания кванта означает амплитуду перехода заряженной частицы с импульсом p в состояние с квантом импульса q и частицей с импульсом $p - q$.

Согласно принципу суперпозиции полная амплитуда перехода представляет собой сумму всех возможных физически различных амплитуд перехода. Точный смысл этого утверждения выяснится ниже на простых примерах. Попытаемся получить интуитивным путем с помощью графиков соотношение, выражающее амплитуду рассеяния двух частиц через потенциал взаимодействия. Графически амплитуда рассеяния изобразится, согласно принципу суперпозиции, суммой графиков:

$$I' = \text{[штрихованный квадрат]} = \text{[волнистая линия]} + \text{[две волнистые линии]} + \text{[три волнистые линии]} + \dots$$

Первый из графиков изображает однократное взаимодействие между частицами. Второй из графиков соответствует двукратному взаимодействию частиц. Между актами взаимодействия стоит амплитуда перехода двух невзаимодействующих частиц.

Будем сопоставлять первому графику потенциал взаимодействия между частицами,

$$\mathbb{I},$$

а каждой прямой линии — функцию Грина, т. е. амплитуду перехода свободной частицы G . Тогда второй график

условно запишется так:

$$\underbrace{\underbrace{\quad}\quad}_{\quad} = UGGU ,$$

так как амплитуда перехода двух свободных частиц равна произведению функций Грина каждой из частиц. Для амплитуды рассеяния получится ряд

$$\Gamma = U + UGGU + UGGUGGU + \dots$$

Выражение, стоящее во втором и следующих членах справа от UGG , снова образует сумму, дающую Γ . Для Γ получается уравнение

$$\Gamma = U + UGG\Gamma.$$

Функция G , входящая в это уравнение, — это уже известная нам амплитуда перехода свободной частицы.

Разумеется, проделанная операция представляет собой не вывод уравнения, а скорее наводящее соображение. Для того чтобы установить, в каком смысле следует понимать символическое умножение в этих выражениях, следует сравнить полученное уравнение с соответствующим выражением, найденным обычным способом из решения уравнения Шредингера. Очевидно, что выражение для Γ представляет собой символическую запись известного из квантовой механики уравнения для амплитуды рассеяния в энергетической нормировке. В системе центра инерции имеем

$$\Gamma(p_1, p_2) = U(p_1, p_2) + \int U(p_1, p') \frac{\Gamma(p', p_2)}{\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p'} + i\gamma} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} . \quad (5.32)$$

Аналогичным образом можно связать функцию Грина частицы во внешнем поле $\tilde{G}$ с функцией Грина свободной частицы G . Функция Грина в поле $\tilde{G}$ изобразится суммой частных амплитуд перехода

$$\tilde{G} = \text{---} + \text{---} \circ \text{---} + \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} + \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} + \dots ,$$

где точка с волнистой линией изображает акт действия внешнего поля V . Собирая все графики, стоящие в $\tilde{G}$

справа от V , получаем опять $\tilde{G}$. Таким образом,

$$\tilde{G} = G + GVG + GVGVG + \dots = G + GV\tilde{G}. \quad (5.33)$$

В рассмотренных нами простых случаях можно обойтись и без графиков. Выражения (5.33) и (5.32) легко могут быть получены непосредственно из уравнения (5.1) для G и аналогичного выражения для двухчастичной функции Грина. Напишем уравнение (5.33) в операторной форме, введя оператор $G^{-1} = \partial/\partial t + iH_0$, где H_0 — гамильтониан свободной частицы. Из (5.1) получаем

$$G^{-1}\tilde{G} + iV\tilde{G} = I, \quad (5.33')$$

откуда

$$\tilde{G} = G + G(-iV)\tilde{G}. \quad (5.33'')$$

Так как в качестве оператора I взято выражение $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t')$, то умножение операторов означает

$$A(x_1, x_2) = BC = \int B(x_1, x')C(x', x_2)d^4x',$$

где $x = (\mathbf{r}, t)$.

Таким образом, соотношение (5.33) в аналитической форме имеет вид

$$\tilde{G}(x_1, x_2) = G(x_1, x_2) + \int G(x_1, x')(-iV(x'))\tilde{G}(x', x_2)d^4x'$$

и, следовательно, график взаимодействия с полем расшифровывается следующим образом:

$$\text{---} \overbrace{\text{---}} \text{---} = -iV.$$

Понимая в выражениях (5.33') и (5.33'') под $\tilde{G}$ двухчастичную функцию Грина, соответствующую уравнению Шредингера для двух частиц, а под V — потенциал взаимодействия $U(x_1 - x_2)$, получим в первом порядке

$$G_2^{(1)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) =$$

$$= \int d^4x_3 d^4x_4 G(x_1, x_3)G(x_2, x_4)(-i)U(x_3 - x_4) \times$$

$$\times G(x_3, x'_1)G(x_4, x'_2) = \begin{array}{c} x_1 \quad x_3 \quad x'_1 \\ \hline \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \hline x_2 \quad x_4 \quad x'_2 \end{array}. \quad (5.34)$$

Это означает, что

$$\left\{ \begin{matrix} x_2 \\ x_1 \end{matrix} \right\} = -iU(x_1 - x_2). \quad (5.35)$$

Для незапаздывающего взаимодействия $U(x_1 - x_2) = U(r_1 - r_2) \delta(t_1 - t_2)$.

Нетрудно получить выражение G_2 в (λ, ε) -представлении. Имеем

$$\begin{aligned} G_2^{(1)}(\lambda_1 \varepsilon_1, \lambda_2 \varepsilon_2, \lambda_3 \varepsilon_3, \lambda_4 \varepsilon_4) = \\ = -i \sum_{\lambda_3 \lambda_4} \int G_{\lambda_1}(\varepsilon_1) G_{\lambda_2}(\varepsilon_2) (\lambda_1 \lambda_2 | U(\omega) | \lambda_3 \lambda_4) G_{\lambda_3}(\varepsilon_1 + \omega) \times \\ \times G_{\lambda_4}(\varepsilon_2 - \omega) \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4) \frac{d\omega}{2\pi}, \end{aligned}$$

где

$$\bar{U}(\omega) = \int d\tau e^{-i\omega\tau} U(\tau).$$

Функция $G_2^{(1)}$ приобретает совсем простой вид в случае взаимодействия свободных частиц. В (p, ε) -представлении имеем ($p = \mathbf{p}$, ε ; $q = \mathbf{k}$, ω)

$$\begin{aligned} G_2^{(1)} = -i \int G(p_1) G(p_2) U(q) \times \\ \times G(p_1 + q) G(p_2 - q) \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \delta(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) \\ (q = p_3 - p_1 = p_2 - p_4). \end{aligned}$$

Нетрудно научиться свободно переходить от одного представления к другому.

Для применения к задаче рассеяния в поле $V(r)$ графики (5.33) удобно собрать следующим образом:

$$\bar{G} = G \{V + VGV + \dots\} G = GAG,$$

где A — амплитуда рассеяния в энергетической нормировке

$$A = V + VGV + VGVGV + \dots = V + VGA. \quad (5.36)$$

Возьмем в качестве G выражение (5.4). Поскольку поле не зависит от времени, величина ε , входящая в G , должна быть взята равной энергии ε_p падающей частицы. Интегрирование по импульсам промежуточных состояний сле-

дует производить с весом $1/(2\pi)^3$, что соответствует суммированию с весом 1 по всем квазидискретным состояниям нормировочного объема. Именно такое суммирование следует из принципа суперпозиции. В импульсном представлении имеем

$$\underline{p_1} \{ p_2 = -iV(p_1 - p_2) .$$

Подставляя согласно найденному нами правилу в (5.36) $A \rightarrow -iA$, $V \rightarrow -iV$, получим

$$A(p, p') = V(p - p') + \int \frac{V(p - p_1) A(p_1, p')}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p_1} + i\delta} \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}, \quad (5.37)$$

что совпадает с (5.32) при замене $\Gamma \rightarrow A$, $U \rightarrow V$. Тем самым подтверждается соотношение (5.37).

В качестве примера, иллюстрирующего удобство графической записи и соответствующих символических выражений, получим интегральное уравнение для амплитуды в форме, удобной для выяснения ее аналитических свойств. Графики для амплитуды могут быть собраны следующим образом:

$$A = V + V \{G + GVG + \dots\} V = V + VG\bar{G}V. \quad (5.38)$$

Пользуясь уже найденным рецептом расшифровки графиков и используя для $\bar{G}$ выражение (5.5) с $\varepsilon = \varepsilon_p$, получим

$$A(p, p') = V_{pp'} + \sum_{\lambda} \frac{A_{p\lambda} A_{\lambda p'}}{\varepsilon_p - \varepsilon_{\lambda} + i\delta}. \quad (5.39)$$

В сумме по λ предполагается суммирование по связанным состояниям ($\varepsilon_{\lambda} < 0$) и интегрирование по сплошному спектру, $A_{p\lambda} \equiv (e^{-ipr}, V(r) \phi_{\lambda}(r))$.

Перейдем от энергетической нормировки к обычной (стр. 215)

$$f(p, p') = f_B(p - p') - \frac{2\pi}{m} \sum_{\lambda} \frac{f_{p\lambda} f_{\lambda p'}}{\varepsilon_p - \varepsilon_{\lambda} + i\delta}, \quad (5.39')$$

где f_B — борновская амплитуда рассеяния.

Из этого выражения следует, что амплитуда, аналитически продолженная в область $\varepsilon_p < 0$, имеет полюса в точках, совпадающих с энергиями связанных состояний.

Обратное утверждение неверно — не все полюса амплитуды соответствуют связанным состояниям (стр. 187).

Рассмотрим мнимую часть равенства (5.39') при $p = p'$. Предполагая, что состояния φ_λ для сплошного спектра нормированы на плоские волны, т. е. имеют асимптотику $\varphi_\lambda \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i p r}$, получим

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} f(p, p) &= -\frac{2\pi}{m} (-\pi) \int |f(p, p_1)|^2 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p_1}) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} = \\ &= \frac{2\pi^2}{(2\pi)^3 m} \frac{p^2}{v} \int |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = \frac{P}{4\pi} \sigma, \end{aligned}$$

что соответствует оптической теореме (стр. 183).

Пока мы расшифровывали только графики, описывающие движения одной свободной частицы или двух частиц, взаимодействующих между собой. Перейдем к интересующему нас случаю частиц, движущихся в среде.

Начнем с простейшего случая одной частицы и поясним, как влияет тождественность частиц на функцию Грина, т. е. поясним введенные интуитивно на стр. 215 выражения. Пусть квазичастица с импульсом p (или в состоянии λ — это не меняет рассуждений) движется на фоне остальных частиц, среди которых с весом n_p присутствует квазичастица с тем же импульсом (для простоты опустим спинные значки).

Тогда амплитуда перехода двух рассматриваемых частиц будет изображаться графиком

$$\begin{array}{c} p \longrightarrow \\ p \longrightarrow \end{array} + \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longrightarrow \end{array} \times n_p.$$

Второй график отличается от первого перестановкой координат добавленной и фоновой частиц. Знак «—» соответствует ферми-, а знак «+» — бозе-частицам. Множитель n_p учитывает число частиц, с которыми можно переставить координаты исходной частицы. Если описывать оба слагаемых как движение одной квазичастицы, получим

$$G^+(p, \tau) = (1 \mp n_p) e^{-i\varepsilon_p \tau} \theta(\tau).$$

Для дырки в случае ферми-частиц можно ввести $v_p = (1 - n_p)$ — число дырок в состоянии p и тем же рассуждением получить множитель $(1 - v_p) = n_p$. В случае бозе-частиц следует учесть изменение в перестанов-

ках n_p частиц от появления дырки, что, как можно увидеть, дает множитель n_p . Поскольку эти же результаты при отсутствии взаимодействия получаются автоматически из нашего определения G на стр. 218, то тем самым подтверждается и уточняется интерпретация G как амплитуды перехода в среде.

Рассмотрим теперь квазичастицу во внешнем поле. Во втором порядке по полю, наряду с графиком

$$\begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ | \quad | \\ t_1 \quad t_2 \\ p \quad p_1 \quad p' \end{array} = a, \quad t_2 > t_1,$$

появится еще и график, которого нет в случае свободных частиц,

$$\begin{array}{c} p \text{---} \circ \text{---} \\ | \quad \diagdown \\ t_1 \quad p_1 \\ \diagup \quad \text{---} \\ \circ \quad p' \\ | \\ t_2 \end{array} = b, \quad t_2 > t_1,$$

и который означает, что в момент t_1 появились квазичастица и квазидырка, а в момент t_2 происходит аннигиляция.

Нам нужно найти аналитическое соответствие графика b . Для этого рассмотрим движение двух частиц: исходной частицы с импульсом p и частицы фона с импульсом p_1 . Тогда сумме графиков a и b соответствуют процессы

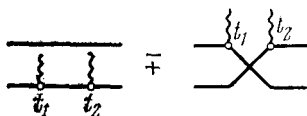
$$\begin{array}{c} p \quad p_1 \quad p' \\ | \quad | \\ t_1 \quad t_2 \\ \hline p_1 \quad p_1 \end{array} \mp \begin{array}{c} p \quad p' \\ \diagdown \quad \diagup \\ p_1 \quad p_1 \\ | \quad | \\ t_1 \quad t_2 \end{array} \quad (5.40)$$

Во втором графике в момент t_1 появилась дырка с импульсом— p_1 и вторая частица с импульсом p' . В момент t_2 исходная частица занимает свободное место. Графики

$$\mp \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \quad \diagup \\ t_1 \quad p_1 \\ \diagdown \quad \text{---} \\ \circ \quad p' \\ | \\ t_2 \end{array} \mp \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \quad \diagdown \\ t_2 \quad p_1 \\ \diagup \quad \text{---} \\ \circ \quad p' \\ | \\ t_1 \end{array}$$

уже учтены тем, что функции Грина частицы и дырки

берутся с множителями $(1 - n_p)$ и n_p . Графики



учитывают изменение фона в поле и влияние на это изменение добавленной частицы. Эти графики не имеют отношения к движению рассматриваемой частицы.

Поскольку второй из графиков (5.40) соответствует перестановке частиц между актами взаимодействия, он берется со знаком «—» для ферми- и со знаком «+» для бозе-частиц. Таким образом, мы приходим к заключению, что график с обратной стрелкой равен

$$\overleftarrow{0} \xleftarrow{\tau} = \mp G(\rho, -\tau) = G(\rho, -\tau)$$

Итак, сумма графиков a и b есть

$$a + b = G^+(-iV) G^+(-iV) G^+ \mp G^+(-iV) G^-(-iV) G^+.$$

Теперь видно удобство введенной нами функции $G(\mathbf{p}, \tau) = G^+(\mathbf{p}, \tau) \mp G^-(\mathbf{p}, -\tau)$. Графики a и b как для ферми-, так и для бозе-частиц могут быть записаны в виде одного графика, объединяющего оба процесса:

$$G^{(2)} = \begin{array}{c} \xrightarrow{t_1} \circ \xrightarrow{\quad} \circ \xrightarrow{t_2} \\ | \qquad \qquad | \\ \text{wavy} \quad \text{wavy} \end{array} = - \int G^+(t_1 - t') V G(t' - t'') V G^+(t'' - t_2) dt' dt'',$$

причем для $\tau = t' - t'' > 0$ функция G совпадает с G^+ и учитывает рассеяние, а для $\tau < 0$ она совпадает с $\mp G^-$ и учитывает рождение пары. Здесь автоматически учтено влияние виртуального образования пар на рассеяние квазичастицы в поле. Выражение для амплитуды рассеяния квазичастиц на рассеивающем центре, помещенном в среду, таким образом, можно получить из найденных выше выражений для частицы заменой свободной функции Грина в промежуточных состояниях на объединенную функцию Грина G в среде. Такая формула может, например, по-

надобиться для определения амплитуды рассеяния электронов металла на примесных атомах.

Такое же замечание можно сделать и об амплитуде рассеяния в результате взаимодействия двух квазичастиц. Для простоты рассмотрим δ -образное взаимодействие между частицами, которое будем изображать точкой. Рассмотрим графические элементы, входящие в амплитуду рассеяния:

$$A = \text{diagram with } \lambda_1, \lambda_2, \lambda, \lambda_3, \lambda_4, \lambda', \theta, \tau, B = \text{diagram with } \lambda_1, \lambda_2, \lambda, \lambda_3, \lambda_4, \lambda', \theta, \tau.$$

График B при $\tau > 0$ описывает движение между актами соударения двух квазичастиц в системе из N частиц и содержит $G_{\lambda}^{+}(\tau) G_{\lambda'}^{+}(\tau)$, а при $\tau < 0$ соответствует двум квазидыркам в системе $(N + 2)$ частиц и содержит $G_{\lambda}^{-}(\tau) G_{\lambda'}^{-}(\tau)$. Оба слагаемых формально объединяются в одно введением $G_{\lambda}(\tau) G_{\lambda'}(\tau)$. То же относится и к графику A , описывающему движение частицы и дырки: имеются два графика в зависимости от знака τ , содержащие $G_{\lambda}^{+} G_{\lambda'}^{-}$ и $G_{\lambda}^{-} G_{\lambda'}^{+}$. Оба графика можно объединить, введя $G_{\lambda}(\tau) G_{\lambda'}(-\tau)$.

Найдем в качестве заготовки для дальнейшего графики A и B в (λ, ε) -представлении. Подставляя $G_{\lambda}(\varepsilon)$ из (5.10), находим

$$A = \text{diagram} = \int \frac{id\varepsilon}{2\pi} G_{\lambda}(\varepsilon) G_{\lambda'}(\varepsilon - \omega) = \frac{n_{\lambda} - n_{\lambda'}}{\varepsilon_{\lambda'} - \varepsilon_{\lambda} + \omega}, \quad (5.41)$$

$$B = \text{diagram} = \int \frac{id\varepsilon}{2\pi} G_{\lambda}(\varepsilon) G_{\lambda'}(E - \varepsilon) = \frac{1 - n_{\lambda} - n_{\lambda'}}{E - \varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}}. \quad (5.42)$$

Здесь E — суммарная энергия двух частиц, ω — суммарная энергия частицы и дырки. В этих выражениях опущены матричные элементы взаимодействия.

Введем еще один графический элемент, который понадобится в дальнейшем. А именно, введем график

$$-i\bar{V} = \text{---} \circ \text{---} , \quad (5.43)$$

описывающий, как мы увидим, взаимодействия выделенной частицы с частицами среды в первом порядке по взаимодействию U . Под кружком следует понимать функцию Грина, взятую при одинаковых координатах. Точнее, будем сопоставлять кружку функцию Грина

$$G(r, r; \tau)_{\tau \rightarrow -0} = \mp n(r) \quad (5.44)$$

(верхний знак соответствует ферми-, а нижний — бозе-частицам, см. (5.14)), умноженную на множитель γ , который мы сейчас определим. График (5.43) описывает акт действия внешнего поля $\bar{V}$ и вместе с тем выражается через взаимодействие U . Имеем

$$(-i\bar{V}) = (-iU) \gamma G_{\tau \rightarrow -0}. \quad (5.45)$$

В координатном представлении

$$\begin{aligned} \bar{V}(r) &= \gamma \int U(r - r', t - t') G(r', r', -0) dr' dt' = \\ &= \gamma \int U(r - r') G(r', r')_{\tau \rightarrow -0} dr', \end{aligned}$$

с другой стороны, существует очевидное соотношение

$$\bar{V}(r) = \int U(r - r') n(r') dr'.$$

Сравнивая с (5.44), получаем $\gamma = \pm 1$, т. е.

$$\text{---} \circ \text{---} = \mp G(r, r; \tau = -0).$$

Таким образом, замкнутой петле следует сопоставлять $G(r, r, \tau = -0)$ с минусом для ферми- и с плюсом для бозе-частиц, т. е. просто $n(r)$.

Как видно из сказанного, можно по-разному выбирать объекты, изучаемые методом графиков. Можно рисовать процессы, происходящие в задаче многих тел с частицами,

но можно иметь дело и с более простым объектом — квазичастицами, у которых функция Грина имеет простой вид, найденный на стр. 222. После того как в предыдущем разделе мы установили связь между частицами и квазичастицами и убедились, что для энергий возбуждения с частотами $\omega \ll \varepsilon_F$ и импульсами $k \ll \varepsilon_F$ квазичастицы представляют собой достаточно точную характеристику возбуждений, для описания многих процессов, можно иметь дело только с квазичастицами. Исключение составляют такие случаи, когда рассматривается взаимодействие системы с частицами, приходящими извне, или когда изучается распределение по импульсам частиц, а не квазичастиц.

В дальнейшем в качестве объекта графического метода будут взяты квазичастицы. Для этой цели будет введено простое выражение, определяющее взаимодействие квазичастиц в системе с δ -образным взаимодействием между частицами. Такое взаимодействие осуществляется в ядерном веществе. Кроме того, будут введены «заряды», характеризующие взаимодействие квазичастиц с внешним полем.

Взаимодействие между квазичастицами. Взаимодействие между квазичастицами отличается от взаимодействия двух частиц в пустоте. Например, взаимодействие между двумя нуклонами в пустоте осуществляется обменом одним или несколькими мезонами, тогда как внутри ядерного вещества, помимо этого механизма, возможно также взаимодействие за счет обмена частицей и дыркой; на графиках амплитуды рассеяния Γ эти оба механизма изобразятся следующим образом:

$$\Gamma = \text{---} + \boxed{\text{---}} + \dots + \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots$$

Волнистая линия означает мезонные функции Грина, а петля соответствует рождению частицы и дырки.

Таким образом, дополнительное взаимодействие представляет собой взаимодействие за счет поляризации среды. Кроме того, из-за принципа Паули изменяются даже те графики взаимодействия, которые не связаны с поляризацией, за счет того, что часть состояний занята остальными нуклонами и недоступна для взаимодействующих частиц.

Нахождение взаимодействия в веществе из взаимодействия двух частиц в пустоте для сильновзаимодействующих

частиц представляет собой сложную задачу, поскольку влияние среды существенно изменяет пустотное взаимодействие. Здесь эта задача не рассматривается. Взаимодействие между квазичастицами будет выражено через несколько констант, которые не вычисляются, а должны быть найдены из сравнения теории с опытом.

В случае ядра радиус сил взаимодействия между квазичастицами приблизительно такой же, как и радиус действия r_0 потенциала взаимодействия в пустоте. Действительно, плотность ядра определяется тем условием, что расстояние между частицами должно быть порядка r_0 . Следовательно, импульс на границе Ферми, который определяется плотностью, связан с r_0 соотношением ($\hbar = m = 1$)

$$p_F r_0 \sim 1.$$

Глубина эффективной потенциальной ямы, в которой движутся ядерные частицы, порядка

$$U = \frac{p_F^2}{2} \sim \frac{1}{r_0^2}.$$

Таким образом, все величины в ядерном веществе, а следовательно, и радиус эффективных сил взаимодействия определяются величиной r_0 как единственной величиной размерности длины, характеризующей как пустотное взаимодействие, так и дополнительное взаимодействие, вызываемое поляризуемостью ядерного вещества.

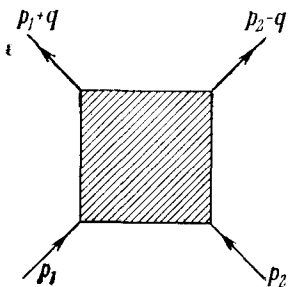


Рис. 47.

Как мы увидим, все задачи, связанные с внешним полем частоты ω , малой по сравнению с энергией границы Ферми ϵ_F , и с волновыми векторами, малыми по сравнению с импульсом p_F на границе Ферми, сводятся к нахождению амплитуды рассеяния с малыми пе-

редаваемыми импульсами ($k \ll p_F$, $\omega \ll \epsilon_F$) в канале двух квазичастиц или, иными словами, с малым суммарным импульсом и малой суммарной энергией в канале

квазичастицы и квазидырки (горизонтальный канал на рис. 47, $q = (\omega, k)$). В этом случае для получения удобного уравнения следует графики, входящие в Γ , классифицировать следующим способом. Выделим в блок $\mathcal{F}$ все графики, которые не содержат частей, соединенных линиями квазичастицы и квазидырки. В блок $\mathcal{F}$ войдут следующие графики:

$$\mathcal{F} = \begin{array}{c} \text{[Diagram: A vertical rectangle with diagonal hatching and four external arrows pointing outwards]} \\ = \text{[Diagram: Two vertical wavy lines with arrows]} + \text{[Diagram: Two vertical wavy lines with an oval in the middle and a diagonal slash]} + \text{[Diagram: Two vertical wavy lines with arrows]} + \text{[Diagram: Two vertical wavy lines with an oval in the middle and arrows]} + \\ + \text{[Diagram: Two horizontal wavy lines with an oval in the middle and arrows]} + \text{[Diagram: Two horizontal wavy lines with an oval in the middle and a diagonal slash]} + \text{[Diagram: Two horizontal wavy lines with arrows]} + \dots \end{array}$$

Зачеркнуты те графики, которые по определению не входят в блок $\mathcal{F}$. Эти графики при малых передаваемых импульсах, как будет показано, существенно зависят от состояний рассеивающихся частиц и поэтому они выделены из блока $\mathcal{F}$.

Все графики, за исключением зачеркнутых, соответствуют при малых передаваемых импульсах δ -образному вкладу в блок $\mathcal{F}$.

Действительно, используя δ -образность пустотного взаимодействия $\mathcal{U} = \text{[Diagram: A circle with a diagonal slash]}$, можно изобразить первые графики $\mathcal{F}$ в виде

$$\mathcal{F} = \begin{array}{c} \text{[Diagram: A circle with diagonal hatching and four external lines labeled } p_1, p_2, p_1+q, p_2-q\text{]} \\ + \text{[Diagram: Two vertically stacked circles with diagonal hatching and external lines } p_1, p_2, p_1+q, p_2-q\text{]} \\ + \text{[Diagram: Three circles with diagonal hatching in a triangular arrangement with external lines } p_1, p_2, p_1+q, p_2-q\text{]} \\ + \text{[Diagram: Four circles with diagonal hatching in a square arrangement with external lines } p_1, p_2, p_1+q, p_2-q\text{]} \end{array}$$

Первые 3 графика зависят от передаваемого импульса q ($q_i = (\epsilon_i, k_i)$), только в меру нелокальности пустотного взаимодействия и для $k \ll \frac{1}{r_0}$, $\omega \ll \frac{c}{r_0}$ могут быть заменены своим значением при $q = 0$.

Для того чтобы убедиться в независимости от q более сложных графиков $\mathcal{F}$, оценим диаграмму

$$\mathcal{F}^{(4)} = \text{Diagram with two vertical lines and four internal loops } q_1, q_2, q_3, q_4 \text{, with shaded top and bottom internal lines.}$$

являющуюся усложнением 4-го графика $\mathcal{F}$. Прямоугольник соответствует локальному блоку, который обозначим Γ . Выражение для $\mathcal{F}^{(4)}$ запишется в виде

$$\mathcal{F}^{(4)} \sim |\Gamma|^2 \int \prod_i \frac{d^4 q_i}{\omega_i - \varepsilon(k_i)} \delta(q - q_1 - q_2 + q_3 + q_4).$$

Так как q_3, q_4 соответствуют дыркам, то k_3, k_4 по определению меньше, чем p_F .

Рассмотрим область интегрирования $\varepsilon_i \gg \varepsilon_F$ и $k_{1,2} \gg p_F$, тогда в знаменателях, соответствующих дыркам, можно пренебречь $\varepsilon(k_{3,4})$ по сравнению с $\omega_{3,4}$ и произвести интегрирование по k_3, k_4 . Получаем

$$\mathcal{F}^{(4)} \sim n^2 |\Gamma|^2 \int \frac{d^3 k_1 \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4 - \omega) \prod d\omega_i}{(\omega_1 - \varepsilon(k_1)) (\omega_2 - \varepsilon(k_1)) \omega_3 \omega_4}.$$

интегрирование по k_2 исключается множителем $\delta(k - k_1 - k_2 + k_3 + k_4)$.

Нетрудно видеть, что наибольший вклад в интеграл по ω_i вносит область $\omega_1 \sim \omega_2 \sim \omega_3 \sim \omega_4 \sim \varepsilon(k_1)$.

Окончательно имеем

$$\mathcal{F}^{(4)} \sim n^2 |\Gamma|^2 \int \frac{d^3 k_1}{\varepsilon(k_1)} \sim n^2 |\Gamma|^2 L,$$

где через L обозначен верхний предел интегрирования по k_1 . Таким образом, получилось расходящееся выражение, значение которого определяется нелокальностью блока Γ .

Поскольку существенная область интегрирования по импульсам порядка L , рассматриваемый график не

зависит от q , если

$$\frac{k}{L}, \frac{\omega}{\varepsilon(L)} \ll 1.$$

В зависимости от характера графиков, входящих в Γ , характерный импульс L может быть порядка $m_{\pi c}$ или m_{nc} . Вообще все графики, содержащие более двух линий, слабо зависят от передаваемого импульса, поскольку при интегрировании по 4-импульсам внутренних линий существенны большие импульсы и энергии ($p \gtrsim p_F$, $\varepsilon \gtrsim \varepsilon_F$)*.

С помощью блока $\mathcal{F}$ все графики, входящие в Γ , можно классифицировать следующим образом: 1) графики, не содержащие двух линий по каналу квазичастица — квазидырка (блок $\mathcal{F}$); 2) по каналу квазичастица — квазидырка сначала идет блок $\mathcal{F}$, затем две линии (квазичастица и квазидырка) и сумма всех графиков, переводящих квазичастицу и квазидырку в новое состояние (т. е. Γ).

Графически уравнение для Γ изобразится так:

$$\Gamma = \text{hatched square } \Gamma = \text{vert-hatched square } \mathcal{F} + \text{F block + circle} + \text{circle + } \Gamma \text{ block},$$

или в символической форме

$$\Gamma = \mathcal{F} + \mathcal{F} G G \Gamma. \quad (5.46)$$

Запишем это выражение в (λ, ε) -представлении, опуская пока значки λ . Поскольку блок $\mathcal{F}$ δ -образен по разности входных времен, то и выражение Γ тоже δ -образно по этой разности. Так как Γ симметрична относительно входных и выходных точек (в чем можно сразу же убедиться, собирая графики в обратном порядке), то Γ зависит только от разности входного и выходного времен и, следовательно, в (λ, ε) -представлении зависит только от суммарной энергии ω квазичастицы и квазидырки, которая сохраняется во всех разрезах этого канала. Опуская общий множитель $\delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4)$ и сопоставляя

*) Более подробно эта аргументация развивается в цитированных выше книгах (стр. 212).

$|p_1| = |p_2| = p_F$ и $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_F$. Поэтому $\mathcal{F}$ зависит только от угла между входными импульсами p_1 и p_2 . Взаимодействие между квазичастицами зависит, кроме того, от спинов квазичастиц и от изотопического спина. Предполагая изотопическую инвариантность, получим

$$\mathcal{F} = C \{f + f' \tau_1 \tau_2 + (g + g' \tau_1 \tau_2) \sigma_1 \sigma_2\}, \quad (5.48)$$

где f, f', g, g' — функции от угла между p_1 и p_2 ; τ, σ — изотопические и спиновые матрицы.

Нормировочный множитель C выберем равным

$$C = \frac{1}{dn/d\varepsilon_F} = \frac{\pi^2}{m^* p_F}.$$

Тогда f, f', g, g' — безразмерные величины порядка 1.

Мы не включили в (5.48) слагаемые вида $(p_1 \sigma_1) (p_2 \sigma_2)$, которые возникают как релятивистская поправка и обращаются в нуль при малых скоростях частиц.

Впрочем, в случае ядра скорости у границы Ферми не очень малы по сравнению со скоростью света, $v/c \sim 1/4$, и эти слагаемые могут оказаться существенными. Так называемые тензорные силы пропорциональны k^2 и поэтому не включены в (5.48). Разложим $\mathcal{F}$ в ряд по полиномам Лежандра, зависящим от косинуса угла между p_1 и p_2 :

$$x = \frac{p_1 p_2}{p_F^2}, \quad \mathcal{F} = \sum_l \mathcal{F}_l P_l(x). \quad (5.49)$$

(Числа f_l, f'_l, g_l, g'_l должны быть найдены из сравнения теории с опытом.) Заметим, что это разложение не имеет ничего общего с обычным разложением амплитуды рассеяния по парциальным волнам, где разложение ведется по функциям P_l от угла отклонения, тогда как в $\mathcal{F}$ угол отклонения положен равным нулю ($k = 0$).

Как показывает сравнение с опытом, в ядрах главную роль играют нулевые гармоники разложения (5.49), т. е. локальное взаимодействие квазичастиц мало зависит от их скоростей.

В уравнение для эффективного поля в бесконечной системе входит $\mathcal{F}$ при передаваемом импульсе q , равном 4-вектору внешнего поля. Поэтому в достаточно однород-

ных полях можно в $\mathcal{F}$ полагать $q = 0$ (с точностью $\sim k/p_F, \omega/\varepsilon_F$).

В конечной системе даже в однородном внешнем поле V^0 эффективное поле V не однородно, а заметно изменяется на расстояниях порядка R . Поэтому нужно иметь выражение для $\mathcal{F}$ при $k \sim 1/R$; при этом можно полагать $\omega = 0$, если $\omega \ll \varepsilon_F$. Поскольку в конечной системе

$$\frac{k}{p_F} \sim \frac{1}{p_F R} \sim \frac{1}{A^{1/3}},$$

достаточно учитывать в $\mathcal{F}$ только слагаемые, не зависящие от k и линейные по k , и пренебрегать членами $\sim k^2$.

3. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ МЕТОДОМ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Уравнение Дайсона. Обоснование модели оболочек. Как известно, так называемая модель ядерных оболочек исходит из предположения, что в ядре имеются энергетические уровни, такие же, как и в системе невзаимодействующих частиц, помещенных в потенциальную яму. До появления метода функций Грина хорошие результаты, получаемые во многих случаях с помощью этой модели, были совершенно необъяснимы. Такая же трудность существовала в теории металлов, где модель свободных электронов хорошо описывала многие явления, несмотря на сильное взаимодействие между электронами. С помощью метода функций Грина удастся объяснить существование одночастичных возбуждений в ферми-системе с сильным взаимодействием.

Будем обозначать точную функцию Грина жирной линией

$$G(l, 2) = \underline{\underline{1 \quad 2}},$$

а функцию Грина свободной частицы — тонкой линией

$$G_0(l, 2) = \underline{1 \quad 2}.$$

Полная амплитуда перехода равна сумме всех возможных

амплитуд, поэтому G выражается через сумму графиков

$$G = \text{---} 1 \text{---} 2 = \text{---} 1 \text{---} 2 + \text{---} 1 \text{---} \overset{3}{\circ} \text{---} 2 + \text{---} 1 \text{---} \overset{4}{\text{---}} \overset{5}{\text{---}} \text{---} 2 + \text{---} 1 \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} 2 + \dots$$

Первый из графиков суммы соответствует амплитуде перехода при условии, что рассматриваемая частица не взаимодействовала с частицами среды, т. е. G_0 . Второй график изображает упругое рассеяние рассматриваемой частицы на частицах среды.

Третий график описывает свободное движение до точки 3, затем происходит неупругое столкновение, в результате которого рассматриваемая частица рождает пару в точке 4. Далее пара исчезает в точке 5, и от точки 6 до точки 2 происходит свободное движение. Аналогично выясняется смысл всех остальных графиков.

Будем классифицировать все графики следующим образом. Прежде всего отделим единственный график, соответствующий свободному движению. Все остальные графики имеют такой вид: до некоторой точки частица движется свободно, затем происходит столкновение, в результате которого образуется и уничтожается несколько частиц и дырок, затем опять свободное движение и акты столкновений повторяются. Поэтому все эти графики имеют следующую структуру: сначала свободное движение, затем сумма графиков, не содержащих частей, соединенных одной линией, и затем полная амплитуда перехода частицы из промежуточного состояния в конечное.

Графически выражение для $G(1, 2)$ будет следующим:

$$G(1, 2) = \text{---} 1 \text{---} 2 = \text{---} 1 \text{---} 2 + \text{---} 1 \text{---} \boxed{\Sigma} \text{---} 2, \quad (5.50)$$

где через Σ обозначена сумма графиков, или, как мы будем говорить, блок, не содержащий частей, соединенных одной линией. Аналитически уравнение (5.50) имеет вид

$$G(1, 2) = G_0(1, 2) + \int G_0(1, 3) \Sigma(3, 4) G(4, 2) d\tau_3 d\tau_4. \quad (5.51)$$

Уравнение (5.51) называется уравнением Дайсона.

Введение блока Σ имеет то преимущество, что он δ -образен в координатном представлении и поэтому характеризуется малым числом констант. Действительно, блок Σ содержит графики, состоящие из трех и более линий, которые, как можно убедиться (см. стр. 239), δ -образны по разностям координат и времени с шириной разброса $\delta r \sim 1/p_F$, $\delta t \sim 1/\epsilon_F$.

В отсутствие внешних полей, когда гамильтониан системы не зависит явно от времени, все величины, входящие в (5.51), зависят только от разности соответствующих времен. Поэтому удобно перейти к представлению Фурье по времени. Получим

$$G(r_1, r_2, \epsilon) = G_0(r_1, r_2, \epsilon) + \int G_0(r_1, r_3, \epsilon) \Sigma(r_3, r_4, \epsilon) G(r_4, r_2, \epsilon) d^3r_3 d^3r_4. \quad (5.52)$$

Уравнение для G_0 в координатном представлении имеет вид (см. уравнение (5.1) на стр. 213)

$$(\epsilon - p^2/2m) G_0(r, r', \epsilon) = \delta(r - r'),$$

где p — оператор импульса, действующий на координату r . Умножая (5.52) слева на $\epsilon - p^2/2m$, получим

$$\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m}\right) G(r, r', \epsilon) - \int \Sigma(r, r_1, \epsilon) G(r_1, r', \epsilon) d^3r_1 = \delta(r - r').$$

Мы для простоты опускаем спинные индексы.

Поскольку блок Σ является δ -образным, второе слагаемое можно изобразить в виде

$$\int \Sigma G d^3r_1 = \alpha G(r, r', \epsilon) + \beta_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 G(r, r', \epsilon)}{\partial r_\alpha \partial r_\beta},$$

где

$$\alpha(r, \epsilon) = \int \Sigma(r, r_1, \epsilon) d^3r_1, \\ \beta_{\alpha\beta}(r, \epsilon) = \frac{1}{2} \int \Sigma(r, r_1, \epsilon) (r_1 - r)_\alpha (r_1 - r)_\beta d^3r_1.$$

В однородной среде $\beta_{\alpha\beta} = \beta \delta_{\alpha\beta}$, где β не зависит от r . В конечной системе это соотношение справедливо с точностью до отношения r_0/R , где r_0 — расстояние между частицами, а R — радиус системы. При $r_0 \ll R$

уравнение для G принимает вид

$$\left[\varepsilon - \frac{p^2}{2m} (1 + 2m\beta) - \alpha(r, \varepsilon) \right] G(r, r', \varepsilon) = \delta(r - r'). \quad (5.53)$$

Рассмотрим уравнение (5.53) для значений ε , лежащих вблизи границы Ферми ε_F , и будем отсчитывать ε от ε_F . Тогда, разлагая величину $\alpha(r, \varepsilon)$ по степеням ε и ограничиваясь первыми двумя членами, получим

$$\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m^*} - U(r) \right) G(r, r', \varepsilon) = Z\delta(r - r'), \quad (5.54)$$

где

$$m^* = \frac{1 - \frac{\partial \alpha}{\partial \varepsilon}}{1 + 2m\beta}, \quad Z = 1 - \frac{\partial \alpha}{\partial \varepsilon}, \quad U(r) = \frac{\alpha(r, 0)}{1 - \frac{\partial \alpha}{\partial \varepsilon}}.$$

Здесь m^* — эффективная масса, Z — перенормировка функции Грина, а $U(r)$ — эффективный потенциал. Все эти величины выражаются через блок Σ , для которого имеется ряд теории возмущений по взаимодействию между частицами. Поэтому принципиально возможно вычислить величины m^* , Z и $U(r)$. Так, например, в первом порядке теории возмущений по взаимодействию между частицами нетрудно получить

$$(m^*)^{(1)} = m, \quad Z^{(1)} = 1, \quad [U(r)]^{(1)} = U_{\text{Х-Ф}},$$

где $U_{\text{Х-Ф}}$ — самосогласованный потенциал Хартри — Фока.

Так как в ядре взаимодействие не мало, то вычисление этих величин связано с очень большими трудностями. Поэтому следует характеризовать потенциал $U(r)$ несколькими константами: глубиной потенциальной ямы, ее радиусом, шириной d -слоя, на котором потенциал переходит от постоянного значения внутри ядра к значению, равному нулю вне ядра. Эти константы вместе со значениями m^* и Z должны быть найдены из сравнения теории с опытом.

Введем теперь систему функций, описывающих квази-частицы с энергией ε_λ , близкой к ε_F :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U(r) \right) \varphi_\lambda = \varepsilon_\lambda \varphi_\lambda.$$

Тогда из уравнения (5.54) получим

$$(\varepsilon - \varepsilon_\lambda) G_{\lambda\lambda'}(\varepsilon) = Z\delta_{\lambda\lambda'}.$$

Это выражение отличается только множителем Z от соответствующего равенства для квазичастицы, которое получается из (5.10').

Таким образом, $G_\lambda(\varepsilon)$ имеет полюс при $\varepsilon = \varepsilon_\lambda$. Этот результат означает, что в системе есть ветвь одночастичных возбуждений. Эти возбуждения соответствуют возбуждениям газа квазичастиц.

Неустойчивость фермиевского распределения в случае притяжения. Возникновение щели в энергетическом спектре. Получим уравнение для амплитуды рассеяния Γ по каналу двух квазичастиц. Для этого введем блок $\mathcal{U}$, не содержащий по этому каналу частей, соединенных двумя линиями квазичастиц. Аналогично тому, как это было сделано выше при получении уравнения (5.46), находим

$$\Gamma = \mathcal{U} + \mathcal{U}GG\Gamma. \quad (5.55)$$

Здесь в отличие от (5.46) GG — функции Грина двух квазичастиц. Блок $\mathcal{U}$ δ -образен по координатам и временам входящих в него линий, по тем же причинам, что и блок $\mathcal{F}$.

Рассмотрим две частицы с суммарной энергией E и суммарным импульсом, равным нулю. Вычислим элемент GG , входящий в это уравнение. С помощью (5.42) получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\mathbf{p}_1, \tau) G(\mathbf{p}_1, \tau) e^{iE\tau} d\tau = i \frac{1 - 2n_{\mathbf{p}_1}}{E - 2E(\mathbf{p}_1) + i\delta} \equiv iB.$$

Подстановка в (5.55) с использованием правил расшифровки графиков дает

$$\Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \mathcal{U}_0 + \mathcal{U}_0 \int \frac{1 - 2n_{\mathbf{p}_1}}{E - 2E(\mathbf{p}_1) + i\delta} \Gamma(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}') \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}. \quad (5.56)$$

Будем искать полюс выражения для Γ . При этом можно пренебречь первым слагаемым в правой части, и получается однородное уравнение. Для наглядности придадим этому уравнению вид, напоминающий уравнение Шредингера для двух частиц. Введем $\Psi(p) = B\Gamma$, тогда для Ψ получаем уравнение

$$(E - 2E(p)) \Psi(p) = (1 - 2n_p) \mathcal{U}_0 \int \Psi(p') \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}.$$

В пустом пространстве ($n_p = 0$) это уравнение совпадает с уравнением Шредингера в импульсном представлении для двух частиц с δ -образным потенциалом взаимодействия $\mathcal{U}_0 = \int \mathcal{U}(r - r') dr'$. Множитель $(1 - 2n_p)$ учитывает изменение этого уравнения в среде. Собственная энергия E находится из соотношения

$$1 = \mathcal{U}_0 \int \frac{1 - 2n_p}{E - 2E(p)} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} = \\ = \mathcal{U}_0 \frac{dn}{d\varepsilon_F} \left\{ - \int_0^{\varepsilon_F} \frac{dE'}{E - 2E'} + \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_1} \frac{dE'}{E - 2E'} \right\}.$$

Мы оборвали интегрирование по E' во втором интеграле величиной ε_1 , которая определяется неточностью предположения о δ -образности $\mathcal{U}$. Согласно сказанному выше $\varepsilon_1 - \varepsilon_F \sim \varepsilon_F$; при малых $(E - 2\varepsilon_F)$ неточность определения ε_1 , как мы увидим, не скажется на результате. Обозначая $E - 2\varepsilon_F = \varepsilon \ll \varepsilon_F$, находим с логарифмической точностью

$$1 \simeq \mathcal{U}_0 \frac{dn}{d\varepsilon_F} \ln \frac{-\varepsilon^2}{\varepsilon_F^2} \equiv \gamma \ln \frac{-\varepsilon^2}{\varepsilon_F^2}. \quad (5.57)$$

Из (5.57) следует, что решение есть только для отрицательных $\mathcal{U}_0$

$$-\varepsilon^2 \simeq \varepsilon_F^2 e^{-1/\gamma}.$$

Таким образом, квадрат энергии ε оказывается отрицательным, что означает существование нарастающих во времени решений $\Psi(t) = \Psi_0 \exp\{\gamma |t|\}$, т. е. неустойчивость системы*). Количество таких коррелированных пар частиц

*) Это обстоятельство было обнаружено Купером в 1956 г.

будет нарастать до тех пор, пока распределение Ферми, и в результате энергия квазичастиц, не изменится таким образом, чтобы возникло устойчивое состояние. Это явление приведет, как мы увидим, к появлению сверхтекучести или в случае заряженных частиц к сверхпроводимости.

Предположим, что неустойчивость, рассмотренная выше, соответствует двум квазичастицам с противоположными спинами (такой случай осуществляется для электронов в сверхпроводнике). Взаимодействия частиц с параллельными и антипараллельными спинами сильно отличаются. Действительно, в силу принципа Паули две частицы с одинаковыми спинами не могут находиться в одной точке пространства, что ослабляет взаимодействие на малых расстояниях и может привести к изменению знака введенной выше величины γ .

В результате неустойчивости образуется «конденсат» коррелированных пар частиц с суммарным спином, равным нулю («куперовские» пары). Существование такого конденсата существенно изменяет свойства частиц с энергией, близкой к границе Ферми. Действительно, частица может перейти в дырку с образованием куперовской пары. Обозначим через Δ амплитуду такого перехода:

$$i\Delta = \rightarrow \textcircled{\Delta} \leftarrow .$$

Тогда амплитуда обратного перехода будет ей комплексно сопряжена ($\langle 1 | V | 2 \rangle = \langle 2 | V | 1 \rangle^*$)

$$-i\Delta^* = \leftarrow \textcircled{\Delta} \rightarrow .$$

При этом к собственной энергии частиц добавится величина

$$\Sigma_k = \rightarrow \textcircled{\Delta} \leftarrow \textcircled{\Delta} \rightarrow .$$

Функция Грина дырки между блоками не содержит переходов в куперовские пары, так как такой переход означал бы появление линии, идущей направо, а величина Σ по определению не содержит частей, соединенных такой линией.

Введем функцию Грина G , учитывающую все графики, кроме рассмотренного выше, тогда получаем соотношение

$$G_s^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma = G_0^{-1} - \Sigma_0 - \Sigma_k = G^{-1} - \Sigma_k, \quad (5.58)$$

где $G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma_0$.

Учет графиков вида Σ_k во внутренних линиях Σ_0 не приведет к существенному изменению этой величины, поскольку при этом особенность, содержащаяся в Σ_k , интегрируется. Действительно, как мы увидим, Σ_k искажает функцию G в энергетическом интервале шириной $\sim \Delta$, малом по сравнению с существенной областью интегрирования по ε и $\varepsilon(\mathbf{p})$ ($\sim \varepsilon_F$), если предположить, что $\Delta \ll \varepsilon_F$. Запишем уравнение в $(\mathbf{p}, \varepsilon)$ -представлении и будем все энергии отсчитывать от границы Ферми. Тогда

$$G_s(\mathbf{p}, \varepsilon) = [G^{-1}(\mathbf{p}, \varepsilon) - \Sigma_k(\mathbf{p}, \varepsilon)]^{-1},$$

где согласно (5.10') и (5.24) при малых $\varepsilon(\mathbf{p})$ и ε

$$G(\mathbf{p}, \varepsilon) \simeq \frac{Z}{\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{p}) + i\delta \operatorname{sign} \varepsilon}.$$

Для $\Sigma_k(\mathbf{p}, \varepsilon)$ имеем

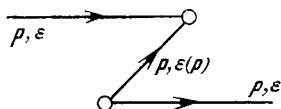
$$\begin{aligned} \Sigma_k(\mathbf{p}, \varepsilon) &= (i\Delta)(-G(-\mathbf{p}, -\varepsilon))(-i\Delta) = \\ &= |\Delta(\mathbf{p}, \varepsilon)|^2 \frac{Z}{\varepsilon + \varepsilon(\mathbf{p}) + i\delta \operatorname{sign} \varepsilon}. \end{aligned} \quad (5.59)$$

Действительно, изменение направления стрелки у линии, стоящей между блоками Δ , как было показано на стр. 234, дает в $(\mathbf{p}, \tau)$ -представлении $-G(-\mathbf{p}, -\tau)$ или в $(\mathbf{p}, \varepsilon)$ -представлении $-G(-\mathbf{p}, -\varepsilon)$.

Получим выражение (5.59) еще одним, гораздо более наглядным способом.

Как видно из выражения для G_s , величина $Z\Sigma_k$ представляет собой поправку к энергии квазичастицы. Эта поправка может быть найдена с помощью обычных правил квантовой механики как квадрат матричного элемента перехода в промежуточное состояние, деленный на разность энергий исходного и промежуточного состояний. В данном случае имеется только одно промежуточное состояние, соответствующее появлению дырки и

коррелированной пары. Переход, соответствующий графику



(3 частицы в промежуточном состоянии), строго запрещен принципом Паули (ср. соответствующее рассуждение в следующем разделе для бозе-частиц). Поскольку роль начальной энергии частицы играет величина ϵ , а дырки в промежуточном состоянии — величина $-\epsilon(p)$, мы непосредственно приходим к выражению (5.59). Величина $Z\Delta$ играет роль соответствующей амплитуды перехода для квазичастиц.

Так как блок $\Delta(p, \epsilon)$ по определению не содержит частей, соединенных одной линией, то он не должен сильно зависеть от p и ϵ и может быть взят на поверхности Ферми

$$\Delta(p, \epsilon) \simeq \Delta(p_F, \epsilon_F) \equiv \Delta e^{i\varphi}.$$

В результате для G_s получаем

$$G_s(p, \epsilon) = \frac{Z}{\epsilon - \epsilon(p) - \frac{\tilde{\Delta}^2}{\epsilon + \epsilon(p)}}. \quad (5.60)$$

Для краткости записи мы отбросили $i\delta \operatorname{sign} \epsilon$ и обозначили $\tilde{\Delta} = Z\Delta$.

Полюса G_s соответствуют энергиям новой квазичастицы и новой квазидырки

$$(E - \epsilon(p))(E + \epsilon(p)) = \tilde{\Delta}^2,$$

откуда

$$E = \pm \sqrt{\tilde{\Delta}^2 + (\epsilon(p))^2}.$$

Вблизи границы Ферми можно положить:

$$\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m^*} - \epsilon_F \simeq v_F(p - p_F).$$

При $\epsilon(p) \gg \tilde{\Delta}$ эти выражения переходят в прежнее выражение для энергии квазичастицы и квазидырки

$$E(p) \rightarrow \pm \epsilon(p).$$

Итак, в спектре системы возникла щель. Минимальная энергия возбуждения, соответствующая появлению квазичастицы и квазидырки вблизи поверхности Ферми, равна $[E^+(p_2) - E^-(p_1)]_{\min} = 2\tilde{\Delta}$. Выражение (5.60) может быть записано в виде, напоминающем выражение (5.10):

$$G_s(p, \varepsilon) = Z \left\{ \frac{1 - v(p)}{\varepsilon - E(p) + i\delta} + \frac{v(p)}{\varepsilon + E(p) - i\delta} \right\},$$

где

$$v(p) = \frac{E(p) - \varepsilon(p)}{2E(p)}.$$

Правильность знаков при $i\delta$ следует из того, что первое слагаемое в фигурной скобке описывает частицу, а второе — дырку, и при переходе в τ -представление $G^+(\tau) = G^-(\tau) = 0$ при $\tau < 0$. Кроме того, видно, что вдали от $p = p_F$ выражение G_s переходит в G выше и ниже границы Ферми.

Из выражения (5.31), связывающего G с распределением частиц, убеждаемся, что $v(p)$ есть новое распределение квазичастиц, заменяющее прежнее ферми-распределение. Вдали от границы Ферми $v(p)$ превращается в прежнее распределение. Таким образом, учет парной корреляции привел к появлению щели в спектре квазичастиц и к сглаживанию скачка в распределении Ферми. Как мы увидим ниже, появление щели в спектре приводит к сверхтекучести, а в случае заряженных частиц — к сверхпроводимости. Для величины Δ может быть получено уравнение, связывающее ее со взаимодействием $\mathcal{U}_0$. Это уравнение соответствует графическому равенству

В правой части к Δ примыкают разные линии: одна — тонкая, другая — жирная. Предоставляем читателю получить это графическое уравнение и его аналитический вид и убедиться, что $\tilde{\Delta}$ определяется соотношением

$$1 = |\gamma| \int_0^{E_1} \frac{d\varepsilon}{V \tilde{\Delta}^2 + \varepsilon^2}, \quad \tilde{\Delta} \simeq E_1 e^{-1/|\gamma|},$$

где $E_1 \sim \varepsilon_F$, а γ определено в (5.57).

Энергетический спектр бозе-систем. Сверхтекучесть. Основное состояние идеального газа бозе-частиц соответствует тому, что все частицы находятся в наинизшем состоянии, отвечающем импульсу $p = 0$ («бозе-конденсация»). Включение взаимодействия разбрасывает частицы по импульсам, однако конечная доля частиц по-прежнему остается в состоянии с $p = 0$, подобно тому как в случае ферми-частиц остается конечный скачок на границе Ферми (стр. 225).

Функция Грина частицы будет, помимо графиков, отвечающих взаимодействию с надконденсатными частицами, содержать графики вида



Волнистой линией обозначены конденсатные частицы. Первый из графиков соответствует тому, что рассматриваемая частица взаимодействует с частицей конденсата, не изменяя числа конденсатных частиц. Графики такого типа описывают потенциальное рассеяние в поле конденсатных частиц. Второй график отвечает более сложному процессу. Частица переходит в дырку в распределении частиц и рождает две конденсатные частицы, которые затем вместе с дыркой опять переходят в рассматриваемую частицу.

Введем величину G , которая определяется всеми графиками, не содержащими перехода в дырку и две конденсатные частицы, аналогичную величине G , введенной в предыдущем разделе,

$$G = G_0 + G_0 \Sigma_0 G. \quad (5.61)$$

Тогда из уравнения Дайсона находим

$$G_s = G + G \Sigma_k G_s. \quad (5.62)$$

Так как $\Sigma_0(p, \epsilon)$ не содержит частей, соединенных одной линией любого направления, она при малых p и ϵ может быть разложена в ряд.

Из уравнения (5.61) следует, что величина $G(p, \varepsilon)$ равна

$$G(p, \varepsilon) = [\varepsilon - \varepsilon^0(p) - \Sigma_0(p, \varepsilon)]^{-1}, \quad \varepsilon^0(p) = \frac{p^2}{2m},$$

откуда при малых p и ε имеем

$$G(p, \varepsilon) = \frac{Z}{\varepsilon - \varepsilon(p) + i\gamma} + G_{\text{Reg}} = ZG_Q + G_{\text{Reg}},$$

где

$$Z = \left[1 - \frac{\partial \Sigma_0}{\partial \varepsilon}\right]^{-1}, \quad \varepsilon(p) = \left(\varepsilon^0(p) + \Sigma_0(0, 0) + \frac{\partial \Sigma_0}{\partial p^2} p^2\right) Z.$$

Величина $G_Q = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon(p) + i\gamma}$ представляет собой функцию распространения квазичастиц «нулевого» приближения, соответствующих выключению переходов в квазидырку и две конденсатные квазичастицы.

Такой прием введения вспомогательных функций Грина, соответствующих выключению каких-либо переходов, может быть широко использован в различных областях теоретической физики. В частности, в ядре для учета парной корреляции используются вспомогательные квазичастицы, соответствующие выключению парного взаимодействия, и с их помощью вычисляются графики, приводящие к парной корреляции.

Найдем величину

$$\Sigma_k = \frac{N}{p} \rightarrow \bigcirc \xleftarrow[-p]{N+2} \bigcirc \rightarrow \frac{N}{p}.$$

Сверху обозначены числа частиц в системе. Дырка с импульсом $-p$ соответствует состоянию системы $(N+2)$ с импульсом p . Таким образом, благодаря существованию конденсата происходит перемешивание состояний:

частица в системе $(N) \rightleftharpoons$ дырка в системе $(N+2)$.

В линии, соединяющей два блока, уже не следует учитывать перехода в дырку, поскольку Σ_k по определению не содержит частей, соединенных одной линией, идущей направо. Мы для простоты опустили линии конденсатных частиц. Будем отсчитывать все энергии от химического потенциала системы; химический потенциал $\mu = E_0(N+1) - E_0(N)$ равен энергии конденсатной частицы, поскольку, переходя от основного состояния системы N

частиц к основному состоянию для $N + 1$ частицы, мы добавляем одну конденсатную частицу.

Таким образом, при отсчете от химического потенциала энергии конденсатных частиц равны нулю и выражение для Σ_k принимает вид, аналогичный формуле (5.59) предыдущего раздела, но с измененным знаком (см. стр. 251):

$$\Sigma_k(p, \varepsilon) = (i\Delta) G(-p, -\varepsilon)(-i\Delta) = -\frac{Z|\Delta|^2}{\varepsilon + \varepsilon(p)}.$$

Для проверки знака в этом выражении воспользуемся обычной теорией возмущений аналогично тому, как это делалось для случая парной корреляции в ферми-системе (стр. 252). В случае бозе-системы имеются 2 возможных промежуточных состояния: 1) соответствующее переходу квазичастицы в квазидырку и две конденсатные квазичастицы и 2) описывающее переход рассматриваемой квазичастицы и двух конденсатных квазичастиц в 2 надконденсатные частицы с импульсом p и одну с импульсом $-p$.

Опустим для простоты множитель Z ($Z > 0$), тогда за счет первого промежуточного состояния получается слагаемое в Σ_k , равное $|\Delta|^2/(\varepsilon + \varepsilon(p))$ с тем же знаком, что и в случае ферми-системы. Во втором промежуточном состоянии, которого нет для ферми-частиц (см. рис. на стр. 252), энергия равна $2\varepsilon + \varepsilon(p)$ и соответствующее слагаемое в Σ_k равно $\frac{2|\Delta|^2}{\varepsilon - 2\varepsilon - \varepsilon(p)} = -\frac{2|\Delta|^2}{\varepsilon + \varepsilon(p)}$. Множитель 2 учитывает тот факт, что имеются 2 бозе-частицы с импульсом p . В результате получаем $\Sigma_k = -\frac{|\Delta|^2}{\varepsilon + \varepsilon(p)}$, что и доказывает правильность полученного выше выражения для Σ_k . Сравнение с этим выражением показывает, что роль амплитуды перехода квазичастиц играет величина $Z\Delta$.

Интересующая нас функция G_s равна

$$G_s = \frac{1}{G^{-1} - \Sigma_k} = Z \frac{\varepsilon + \varepsilon(p)}{\varepsilon^2 - \varepsilon^2(p) + Z^2 |\Delta(p, \varepsilon)|^2} + G_{\text{Reg.}} \quad (5.63)$$

Рассмотрим полюсную часть этого выражения при малых p, ε . Среди возбуждений с $p \rightarrow 0$ обязательно должны существовать такие возбуждения, которые в пределе

малых p переходят в смещение системы как целой. Такие возбуждения должны иметь частоту, стремящуюся к нулю при $p \rightarrow 0$ (теорема Гольдстоуна). Примером таких возбуждений являются звуковые колебания. Поэтому величина G_s должна иметь полюс при $p = 0$, $\varepsilon = 0$. Энергия $\varepsilon(p) = Z (\Sigma(0, 0) - \mu + O(p^2))$ (стр. 255), и согласно (5.63) имеем условие

$$[\mu - \Sigma_0(0, 0)]^2 = |\Delta(0, 0)|^2,$$

откуда

$$\mu = \Sigma_0 \pm \Delta_0, \quad \Sigma_0 \equiv \Sigma(0, 0), \quad \Delta_0 \equiv |\Delta(0, 0)|. \quad (5.64)$$

Мы увидим, что в силу аналитических свойств функции Грина (положительность вычета в полюсе) в этом выражении следует брать нижний знак.

Разложим выражения, входящие в G_s , в ряд вблизи $p, \varepsilon = 0$. В числителе можно положить $p, \varepsilon = 0$. Следовательно,

$$\varepsilon + \varepsilon(p) \simeq \Sigma_0 - \mu = \mp \Delta_0.$$

Как мы сейчас увидим, вблизи полюса G_s существенны $\varepsilon \sim p$.

Обозначая

$$Z\Delta_0 = \frac{\Delta_0}{1 - \frac{\partial \Sigma_0}{\partial \varepsilon}} = \tilde{\Delta}_0, \quad Z\Delta(p, \varepsilon) = \tilde{\Delta}(p, \varepsilon),$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{\partial \Sigma_0}{\partial p^2} p^2 \right) Z \equiv \frac{p^2}{2m^*},$$

получим

$$G_s = Z \frac{\mp \tilde{\Delta}_0}{\varepsilon^2 - \left(\frac{p^2}{2m^*} + \tilde{\Delta}_0 \right)^2 + |\tilde{\Delta}(p, \varepsilon)|^2}.$$

Как видно из аналитических свойств функции Грина для бозе-частиц (стр. 249) при $\langle a_p^+ a_p \rangle = n(p) \gg 1$ (что, как мы убедимся, осуществляется в нашем случае) функция Грина должна быть четной функцией ε . Поэтому и $|\tilde{\Delta}(p, \varepsilon)|^2$ есть четная функция ε

$$|\tilde{\Delta}(p, \varepsilon)|^2 = \tilde{\Delta}_0^2 + \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial p^2} p^2 + \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial \varepsilon^2} \varepsilon^2.$$

В результате выражение для G_s приобретает вид

$$G_s = Z \frac{\mp \tilde{\Delta}_0}{\varepsilon^2 - E^2(p)}, \quad (5.65)$$

$$E^2(p) = c^2 p^2 + \left(\frac{p^2}{2m^*} \right)^2 \frac{1}{1 - \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial \varepsilon^2}},$$

$$c^2 = \frac{1}{1 - \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial \varepsilon^2}} \left(\frac{\tilde{\Delta}_0}{m^*} - \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial p^2} \right).$$

Таким образом, полюса G_s при $p \rightarrow 0$ отвечают звуковым возбуждениям *).

Мы сохранили в знаменателе (5.65) слагаемое $\left(\frac{p^2}{2m^*} \right)^2$, которое на первый взгляд незаконно, поскольку члены p^4 и ε^4 отбрасывались. Однако это слагаемое дает правильный переход к случаю больших p . (При достаточно больших p следует заменить m^* на m , положить $\frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial \varepsilon^2} = 0$, и $E(p)$ переходит в энергию свободной частицы.) В системе со слабым взаимодействием сохранение этого слагаемого законно, и выражение (5.65) делается правильным при всех импульсах.

Определим знак в числителе G_s . Рассмотрим систему со слабым взаимодействием. Тогда $\frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial \varepsilon^2} \ll 1$. Вытекающая из (5.18) положительность вычета в полюсе означает, что следует взять нижний знак «+», что соответствует знаку «—» в (5.64).

Но после того, как определен знак, из положительности вычета следует, что при любом взаимодействии

$$1 - \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial \varepsilon^2} > 0.$$

Предоставляем читателю убедиться, что из положительности вычета G следует $1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon} > 0$.

*) Звуковой характер спектра неидеального бозе-газа был обнаружен в работе Боголюбова (1947). Метод, использованный в этой работе (метод канонических преобразований), оказал большое влияние на применение квантовой теории в задаче многих тел.

Из выражения для скорости звука находим также

$$\frac{\tilde{\Delta}_0}{m^*} - \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial p^2} > 0.$$

Окончательно имеем

$$G_s = \frac{a}{\varepsilon^2 - E^2(p) + i\delta}, \quad (5.66)$$

где

$$a = \frac{Z |\tilde{\Delta}_0|}{\left(1 - \frac{\partial |\tilde{\Delta}|^2}{\partial \varepsilon^2}\right)} > 0.$$

Мы выбрали знак мнимой добавки так, чтобы функция Грина частицы $G_s^+(E(p), t) = G_s(E(p), t)_{t>0}$ соответствовала затухающему, а не нарастающему решению.

Запишем G_s в виде

$$G_s = \frac{a}{2E(p)} \left(\frac{1}{\varepsilon - E(p) + i\delta} - \frac{1}{\varepsilon + E(p) - i\delta} \right)$$

и найдем $G_s(p, t)$ при $t < 0$. При интегрировании по ε остается только второе слагаемое

$$G_s(p, t) = \int G_s(p, \varepsilon) e^{-i\varepsilon t} \frac{i d\varepsilon}{2\pi} \Big|_{t \rightarrow -0} = \frac{a}{2E(p)}.$$

С другой стороны, для бозе-системы мы имели (стр. 219) $G(p, t = -0) = \langle a^+(p) a(p) \rangle \equiv n(p)$. Поэтому для распределения частиц по импульсам получаем:

$$n(p) = \frac{a}{2E(p)} \Big|_{p \rightarrow 0} = \frac{a}{2cp} \gg 1. \quad (5.67)$$

Таким образом, $n(p)$ имеет полюс при $p \rightarrow 0$.

При больших p , ε функция G_s (см. (5.63)) переходит в функцию Грина свободных частиц, т. е. $E(p)$ переходит в $\varepsilon_p^0 = \frac{p^2}{2m} - \mu$. Таким образом, зависимость $E(p)$ начинается с линейного участка и при больших p должна переходить в квадратичную. Как ведет себя $E(p)$

в промежуточной области? Расчет теплоемкости жидкого гелия, соответствующей звуковым колебаниям, дал результат меньший, чем наблюдаемая теплоемкость. Отсюда следует, что помимо звуковых возбуждений, имеются еще и другие возбуждения с малыми энергиями (Мигдал, 1940 г.).

Ландау сделал предположение, что кривая $E(p)$ имеет минимум (рис. 48). Возбуждения с импульсом p , близким к p_0 , и дают добавочный вклад в теплоемкость. Это предположение блестяще подтвердилось на опыте.

Спектр справа от p_0 в точке p_1 исчезает (т. е. исчезает полюс в функции Грина). Причина этого состоит в распаде возбуждения с импульсом p на возбуждения с меньшими импульсами (Питаевский, 1959).

Жидкости со спектром $E(p) = cp$, так же как и жидкости со спектром $E(p) = \sqrt{\Delta^2 + (p - p_F)^2 v_F^2}$, полученным в предыдущем разделе, обладают свойством сверхтекучести, т. е. протекают через узкие трубки без трения.

Перейдем в систему координат, движущуюся вместе с жидкостью. Сверхтекучесть означает, что стенки трубки или вообще любое тело, движущееся в жидкости, не тормозится. При низких температурах единственный механизм торможения — это передача энергии элементарным возбуждениям. Пусть тело уменьшило свой импульс на величину p , энергия тела изменяется при этом на величину pv , где v — скорость тела. Условие сверхтекучести (критерий Ландау) означает

$$pv < E(p), \quad (5.68)$$

поскольку pv — наибольшее изменение энергии тела при заданной передаче импульса. При больших скоростях v этот критерий нарушается. Критическая скорость v_k , при которой сверхтекучесть прекращается, определяется условием $v_k = (E(p)/p)_{\min}$.

Спектр возбуждений ферми-системы без парной корреляции не удовлетворяет критерию (5.68) даже при

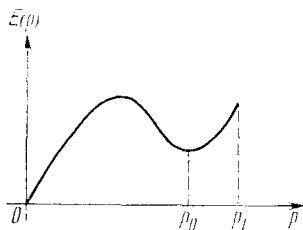


Рис. 48.

скоростях $v \rightarrow 0$. Энергия возбуждения в такой системе $E(p_1, p_2) = \varepsilon(p_1) - \varepsilon(p_2)$; $p_1 > p_F$, $p_2 > p_F$. При малых импульсах возбуждения $E = v_F p$, и следовательно, критерий сверхтекучести нарушается при сколь угодно малых v . В случае же спектра с парной корреляцией критерий сверхтекучести нарушается, только начиная с некоторой скорости v . Поэтому электроны сверхпроводника при достаточно слабом токе двигаются сквозь решетку атомов без торможения (сверхпроводимость). В случае спектра $E(p) = cp$ критическая скорость равна $v_k = c$.

Явление сверхтекучести жидкого гелия было экспериментально обнаружено Капицей (1937 г.). Как показал Ландау, все возникающие при конечных температурах эффекты объясняются своеобразной гидродинамикой двух проникающих друг в друга жидкостей — «сверхтекучей» и «нормальной». Теория жидкого гелия — одна из самых блестящих работ Ландау.

4. СИСТЕМА ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Многие свойства систем (статические моменты, вероятности переходов, энергии первых уровней и др.) легко определяются, если известно изменение матрицы плотности квазичастиц во внешнем поле и ее изменение при добавлении частиц к системе. Матрица плотности, как мы видели, просто связана с функцией Грина (стр. 223). Для ее нахождения поступают следующим образом. Сначала определяется изменение функции Грина в эффективном поле, возникающем в системе под влиянием внешнего поля.

Эффективное поле складывается из внешнего поля и поляризационного поля, возникающего от перераспределения частиц. Это перераспределение выражается через изменение функции Грина в эффективном поле. В результате возникает замкнутая система уравнений для определения эффективного поля.

Определим изменение функции Грина квазичастицы во внешнем поле. Ограничимся для простоты первым приближением теории возмущений по полю. Взаимодействие между частицами будем учитывать точно. Запишем не-

сколько графиков, входящих в функцию Грина квазичастицы в поле G' :

$$\begin{aligned}
 G' &= \text{---} + \text{---} \circ \text{---} + \text{---} \triangle \text{---} + \text{---} \triangle \text{---} + \dots = \\
 &= \text{---} + \text{---} \triangle \text{---} = G + GVG.
 \end{aligned}
 \tag{5.69}$$

Здесь кружок описывает непосредственное взаимодействие квазичастицы с внешним полем V^0

$$\text{---} \circ \text{---} = e_q V^0 / i,$$

e_q — «заряд» квазичастицы. Как мы увидим, для некоторых типов полей $e_q \neq 1$. Для невзаимодействующих частиц мы имели

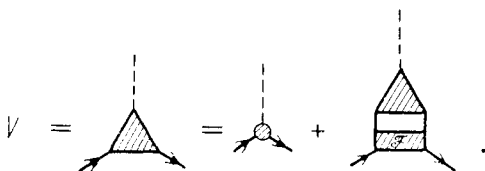
$$G'_0 = \text{---} + \text{---} \circ \text{---} = G_0 + G_0 e_q V^0 G_0.$$

Таким образом, заштрихованный треугольник в формуле (5.69) заменяет точку на этом графике и представляет собой эффективное поле V , действующее на квазичастицу.

Получим уравнение для поля V . Среди графиков, входящих в V , есть один график, не содержащий взаимодействия между квазичастицами ($e_q V^0$). Все остальные графики имеют следующую структуру. Если двигаться со стороны основания к вершине треугольника, то все графики начинаются со взаимодействия, затем идут две линии свободного движения и затем совокупность графиков, изображающая эффективное поле. Введем блок $\mathcal{F}$, не содержащий частей, соединенных двумя линиями. Тогда эффективное поле определяется уравнением

$$V = e_q V^0 + \mathcal{F} GGV, \tag{5.70}$$

или графически



Первое слагаемое в V описывает непосредственное воздействие внешнего поля на квазичастицу. Второе слагаемое дает дополнительное поле, возникающее из-за поляризации среды, т. е. вызванное воздействием перераспределенных нуклонов ядра.

В λ -представлении получаем (см. стр. 242)

$$V_{\lambda_1 \lambda_2} = e_q V_{\lambda_1 \lambda_2}^0 - \sum (\lambda_1 \lambda_2 | \mathcal{F} | \lambda \lambda') A_{\lambda \lambda'} V_{\lambda \lambda}, \quad (5.71)$$

где

$$A_{\lambda \lambda'} = \int G_{\lambda}(\varepsilon) G_{\lambda'}(\varepsilon - \omega) \frac{i d\varepsilon}{2\pi}. \quad (5.72)$$

Как мы видели (стр. 235)

$$A_{\lambda \lambda'} = \frac{n_{\lambda} - n_{\lambda'}}{\varepsilon_{\lambda'} - \varepsilon_{\lambda} + \omega}. \quad (5.72')$$

Изменение распределения частиц в поле. Полученные нами результаты имеют чрезвычайно простой физический смысл, который мы выясним на примере большой системы. В этом случае удобно использовать импульсное представление, что соответствует $\varphi_{\lambda} = e^{ipr}$. Тогда $A_{\lambda \lambda'}$ можно записать в виде

$$A_{\lambda \lambda'} = A_{p, p-k} = \frac{n(p) - n(p-k)}{\varepsilon(p-k) - \varepsilon(p) + \omega}.$$

При $k \ll p$ разность $\varepsilon(p) - \varepsilon(p-k) \approx \frac{d\varepsilon}{dp} k = kv$, а $n(p-k) - n(p) = -\frac{dn(p)}{d\varepsilon} kv$. Изменение матрицы плотности согласно (5.28) (стр. 223) выражается через изменение функции Грина в поле, т. е. в символическом виде

$$\delta\rho = (GGV)_{\tau \rightarrow -0} = AV. \quad (5.73)$$

Обозначая $\delta r = f_k(p)$, где $f_k(p)$ есть k -компонента Фурье функции распределения $f(r, p)$, получим

$$(\omega - kv) f_k(p) - \frac{dn(p)}{d\varepsilon} vkV_k = 0, \quad (5.74)$$

или в координатном представлении

$$\frac{\partial f(r, p)}{\partial t} + v \nabla f(r, p) - \frac{\partial f^0}{\partial p} \nabla V = 0, \quad (5.74')$$

где $f^0(r, p) = n(p)$.

Таким образом, соотношение $\delta r = AV$ эквивалентно обычному уравнению для изменения функции распределения во внешнем поле. При k , сравнимом с p , мы получили бы так называемое квантовое уравнение для функции распределения. Выражение (5.72') приводит к этому более общему уравнению в λ -представлении.

Уравнение (5.74) не только позволяет найти реакцию системы на внешнее поле, но и определить частоты собственных колебаний системы с квантовыми числами, соответствующими симметрии поля. Так, например, в случае векторного поля в системе возбуждаются колебания векторного типа, а для внешнего поля, соответствующего возмущению вида $H' = \mu \sigma_{\lambda\lambda'} a_{\lambda'}^{\dagger} a_{\lambda} \mathcal{H}$ ($\mathcal{H}$ — магнитное поле), — спинорного типа. Собственные частоты будут определяться как полюса $V(\omega)$ (см. ниже).

Спиновая поляризуемость и магнитный момент квазичастицы. Для статического поля уравнение (5.70) может быть просто записано в координатном представлении

$$V(r) = e_q V^0(r) - \int \mathcal{F}(r - r') \frac{dn}{d\varepsilon_F} V(r') dr'. \quad (5.75)$$

При выводе этого выражения мы использовали отношение $\frac{n_{\lambda} - n_{\lambda'}}{\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}} \underset{k \rightarrow 0}{=} \frac{dn_{\lambda}}{d\varepsilon_{\lambda}} = -\frac{dn_{\lambda}}{d\varepsilon_F}$, а также полноту функций φ_{λ} . Учитывая δ -образность $\mathcal{F}$, запишем $\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \delta(r - r')$. Предположим, кроме того, что взаимодействие не зависит от скоростей и спиновых переменных частиц. Тогда (см. стр. 243)

$$V(r) = \frac{e_q V^0(r)}{1 + f}, \quad (5.76)$$

где $f = \mathcal{F}_0 \frac{dn}{d\varepsilon_F}$ — характеризует поляризуемость среды во внешнем поле, а величина $(1 + f)/e_q$ представляет собой аналог диэлектрической проницаемости. В случае магнитного поля, действующего на ядро, возмущение $H' \simeq \simeq a_\lambda^+ a_\lambda \sigma_{\lambda\lambda'}$, т. е. мы имеем дело со спиновым полем. Если бы ядро было достаточно большой системой, то заменяя в (5.76) f на g , мы получили бы изменение спиновой части магнитного момента одной частицы в результате спиновой поляризации ядерного вещества (в ядре $g \simeq 1$), т. е. спиновый магнитный момент квазичастицы

$$\mu^s \simeq \frac{\mu_0^s}{1 + g}, \quad (5.77)$$

где μ_0^s — спиновая часть магнитного момента свободного нуклона. Нахождение спиновой поляризуемости в сферических ядрах требует численного решения уравнения (5.71) в λ -представлении. В деформированных ядрах, в которых одночастичные уровни расположены гуще из-за снятия вырождения по проекции углового момента, ситуация более близка к случаю бесконечной системы, и формула (5.77) приближенно справедлива.

Звуковые колебания в ферми-системе («нулевой звук»). Из уравнения (5.71) в случае бесконечной системы получаем

$$V_k = e_q V_k^0 + \mathcal{F}_0 \int \frac{n(p) - n(p+k)}{\varepsilon(p) - \varepsilon(p+k) + \omega} 2 \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} V_k. \quad (5.78)$$

Здесь учтена δ -образность $\mathcal{F}$, а также тот факт, что при малых k в интеграле по $d^3 p$ существенны только значения $|p| \simeq p_F$.

Вычислим интеграл, входящий в это выражение.

Используя в подинтегральном выражении малость k и формулу $\frac{dn(p)}{d\varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$, получим

$$\begin{aligned} \int \frac{n(p) - n(p+k)}{\varepsilon(p) - \varepsilon(p+k) + \omega} 2 \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} = \\ = -\frac{dn}{d\varepsilon_F} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{kv_F x}{\omega - kv_F x} dx \equiv -\frac{dn}{d\varepsilon_F} \Phi(k, \omega), \end{aligned} \quad (5.79)$$

где $\Phi(k, \omega)$ дается выражением (для $k^2/4p_F^2 \ll 1$)

$$\Phi(k, \omega) = 1 - \frac{\omega}{2kv_F} \ln \left| \frac{\omega + kv_F}{\omega - kv_F} \right| + i\pi \frac{\omega}{2kv_F} \theta(kv_F - \omega)$$

($\theta(x)$ — тэта-функция). Функция Φ , как мы увидим, определяет дисперсию (зависимость $\omega(k)$) собственных колебаний в системе. Появление мнимой части в уравнении для V соответствует тому, что при $\omega < kv_F$ поле может рождать пары ($\omega = kv$), тогда как при $\omega > kv_F$ рождение пары невозможно ($\omega > kv$ для всех $v < v_F$).

Уравнение для эффективного поля принимает вид

$$V_k = e_q V_k^0 - \mathcal{F}_0 \frac{dn}{d\varepsilon_F} V_k \Phi(k, \omega). \quad (5.80)$$

В зависимости от симметрии поля V в это выражение входят различные слагаемые выражения для $\mathcal{F}$ (стр. 243). Так, в случае скалярного поля входит константа f , а в случае спинорного поля $V \sim \sigma$ в символическое произведение $\mathcal{F}V$ входит константа спин-спинового взаимодействия g (мы для краткости опускали спиновые значки в матричном элементе $\mathcal{F}$).

Таким образом, уравнение для скалярного поля V принимает вид

$$V_k = \frac{e_q V_k^0}{1 + f\Phi(k, \omega)}. \quad (5.81)$$

В случае спинорного поля f заменяется на g .

Собственные колебания определяются полюсом выражения для V_k

$$1 = -f\Phi(k, \omega). \quad (5.82)$$

Предположим, что $\omega = \gamma kv_F$. Тогда уравнение (5.82) принимает вид

$$1 + f = f \frac{\gamma}{2} \ln \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}.$$

Незатухающее решение соответствует $\gamma > 1$. Такое решение есть при $f > 0$

$$\gamma \ln \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} = 2 \frac{1 + f}{f}.$$

Из (5.84) для V_k находим ($\Phi(k, 0) = 1$)

$$V_k = \frac{4\pi Q}{k^2 + \kappa^2}, \quad \kappa^2 = 4\pi e^2 \frac{dn}{d\varepsilon_F}. \quad (5.85)$$

Переходя в координатное представление, имеем

$$V(r) = \frac{Q}{r} e^{-\kappa r}. \quad (5.85')$$

Наши выражения были получены при $k \ll p_F$, при переходе в координатное представление это соответствует $r \gg 1/p_F$.

Таким образом, на больших расстояниях заряд полностью экранируется зарядами плазмы.

В случае $\omega \gg kv_F$ легко получить $\Phi(k, \omega) = -\frac{k^2 v_F^2}{3\omega^2}$, и подставляя в (5.84), находим

$$V_k = \frac{V_k^0}{1 - \frac{4\pi e^2 n}{m\omega^2}}. \quad (5.86)$$

Это выражение имеет полюс при

$$\omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}.$$

Так как при этом затухание отсутствует, то в системе возможны незатухающие колебания. Величина

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}} \quad (5.87)$$

называется плазменной частотой.

Важно отметить, что полученные выше результаты не предполагают малости взаимодействия и являются точными в пределе малых k .

Выражение, стоящее в знаменателе (5.86), по определению представляет собой диэлектрическую постоянную

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{m\omega^2},$$

что совпадает с результатом, полученным на стр. 179.

Законы сохранения и заряды квазичастиц для различных полей. Законы сохранения накладывают сильные ограничения на заряды e_q квазичастиц. Мы ограничимся

наводящими физическими соображениями, опуская формальный вывод приведенных ниже результатов *).

Прежде всего рассмотрим следствия, вытекающие из требования калибровочной инвариантности. Это требование состоит в том, чтобы векторное внешнее поле вида

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r_\alpha}, \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right),$$

действующее на протоны или нейтроны, не производило никаких физических изменений в системе. Напомним, что в случае электромагнитного поля векторный потенциал $A_i = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}$ соответствует равному нулю электрическому и магнитному полям, т. е. не оказывает никаких физических воздействий на частицы.

Рассмотрим сначала скалярное поле вида

$$V(t) = V^0 e^{i\omega t},$$

где V^0 — константа. Это поле является частным случаем фиктивного поля $\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r_\alpha} = 0, \frac{\partial \Phi}{\partial t} = V^0 e^{i\omega t} \right)$.

Поскольку в таком поле никаких физических изменений системы не происходит, то эффективное поле должно равняться внешнему полю

$$V = V^0.$$

Мы имели

$$V = e_q V^0 + (\mathcal{F} A V).$$

При $V = V^0 = \text{const}$ второе слагаемое отсутствует и получаем $e_q = 1$, причем, если поле V^0 действует на протоны (нейтроны), то и поле V будет действовать только на протоны (нейтроны). Поэтому для скалярного поля находим

$$e_q^{\text{pp}} = e_q^{\text{nn}} = 1, \quad e_q^{\text{np}} = e_q^{\text{pn}} = 0. \quad (5.88)$$

Поскольку e_q определяется графиками, соответствующими большим энергиям (или, в координатном представлении, малым расстояниям около рассматриваемой точки),

*) А. Б. М и г д а л, Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, «Наука», 1965.

то этот же результат сохраняется для всех скалярных полей, достаточно однородных в пространстве и времени ($k \ll p_F$, $\omega \ll \varepsilon_F$).

Дальнейшие сведения о зарядах квазичастиц можно получить, используя тот факт, что в некоторых полях (уже не фиктивных) тем не менее не происходит перераспределения частиц и, следовательно, эффективное поле равно внешнему. Например, в однородном поле, действующем одинаково на оба типа частиц, система колеблется как целое.

В этом случае возмущение пропорционально полному импульсу системы

$$P = \sum_{n+p} p_i.$$

Здесь суммирование происходит по нейтронным и протонным состояниям. В наших обозначениях это соответствует полю $V_\alpha^0 = p_\alpha^n + p_\alpha^p$, где $\alpha = (x, y, z)$. Из того факта, что при этом в системе не происходит внутренних изменений, нетрудно получить

$$V_{\lambda\lambda}^p [p_\alpha^p + p_\alpha^n] = p_\alpha = (e_q^{pp} + e_q^{np}) p_\alpha \quad (5.89)$$

(в квадратной скобке при V записано затравочное возмущение V^0). Таким образом,

$$e_q^{pp} + e_q^{np} = e_q^{nn} + e_q^{np} = 1. \quad (5.90)$$

В силу изотопической инвариантности в ядре с $N \simeq Z$ эффективный заряд нейтронного поля в случае затравочного поля, действующего на протоны e_q^{np} , равен заряду e_q^{pn} протонного поля, вызванного затравочным полем, действующим на нейтроны $e_q^{pn} = e_q^{np}$. Кроме того, $e_q^{nn} = e_q^{pp}$.

Аналогично заключаем, что сумма $e_q^{pp} + e_q^{np} = 1$ для любого возмущения, коммутирующего с гамильтонианом H и имеющего только диагональные матричные элементы в λ -представлении, т. е. для возмущения вида

$$H' = \sum a_\lambda^+ a_\lambda Q_{\lambda\lambda}, \quad (5.91)$$

если оператор H' коммутирует с H . Такое возмущение будем называть диагональным. Нетрудно видеть, что диа-

гональное возмущение сдвигает энергии частиц и не приводит к перераспределению частиц, если только

$$\tilde{\epsilon}_\lambda = \epsilon_\lambda^0 + Q_{\lambda\lambda}$$

соответствует прежнему расположению уровней (что всегда выполнено при малых $Q_{\lambda\lambda}$).

Получим выражение для эффективного заряда в случае спинорного поля (возмущение вида σH).

Так как заряд e_q определяется локальным взаимодействием частиц, его величина в ядре мало отличается от соответствующей величины в неограниченном ядерном веществе той же плотности. Предположим, что спин-орбитальное взаимодействие в ядерном веществе мало, тогда оператор полного спина системы коммутирует с гамильтонианом. Кроме того, в достаточно большой системе спин-орбитальная поправка к гамильтониану квазичастиц играет малую роль и может быть опущена. Тогда функции ϕ_λ являются собственными функциями оператора σ_z . Таким образом, возмущение диагонально и, следовательно,

$$e_q^{pp} + e_q^{np} = 1. \quad (5.92)$$

Запишем это условие в виде

$$e_q^{pp} = 1 - \xi_s, \quad e_q^{np} = \xi_s. \quad (5.92')$$

Величина ξ_s не вычисляется и должна находиться из опыта.

Покажем, что эта же величина входит в перенормировку аксиальной константы β -распада в ядре. Для разрешенных гамов-теллеровских переходов взаимодействие с электрон-нейтринным полем дает в гамильтониане нуклонов возмущение, пропорциональное $(\tau_x + i\tau_y)\sigma_z$ (псевдовекторное взаимодействие). Найдем эффективный заряд для такого внешнего поля.

Рассмотрим сначала поле $\tau_z\sigma_z$:

$$\tau_z\sigma_z = \frac{1 + \tau_z}{2} \sigma_z + \frac{\tau_z - 1}{2} \sigma_z = \sigma_z^p - \sigma_z^n.$$

Слагаемое $e_q V^0$ в уравнении для V в этом случае равно

$$\begin{aligned} e_q [\tau_z\sigma_z] \tau_z\sigma_z &= e_q [\sigma_z^p] \sigma_z - e_q [\sigma_z^n] \sigma_z = \\ &= \begin{vmatrix} e_q^{pp} - e_q^{pn} \\ e_q^{np} - e_q^{nn} \end{vmatrix} \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 - 2\xi_s \\ -(1 - 2\xi_s) \end{pmatrix} \sigma_z = (1 - 2\xi_s) \sigma_z \tau_z. \end{aligned}$$

В квадратной скобке указан вид поля V^0 , для которого заряд равен $e_q [V^0]$. Итак,

$$e_q [\tau_z \sigma_z] = (1 - 2\xi_s). \quad (5.93)$$

В силу изотопической инвариантности такой же заряд будет и для поля $(\tau_x + i\tau_y) \sigma_z$.

Таким образом, множитель $e_q = (1 - 2\xi_s)$ дает перенормировку псевдовекторной константы β -распада в ядерном веществе. Для поля $(\tau_x + i\tau_y)$, которое соответствует фермиевским переходам (векторное взаимодействие), получаем (рассматривая сначала поле τ_z) $e_q = 1$, т. е. перенормируемость векторного взаимодействия.

КАЧЕСТВЕННЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

Квантовая теория поля описывает взаимодействие элементарных частиц, движущихся в вакууме. При этом число участвующих частиц не всегда сохраняется — частицы могут рождаться и исчезать в процессе взаимодействия. Даже в тех случаях, когда число частиц в начале и конце процесса совпадает, образование виртуальных частиц в промежуточных состояниях, согласно общим принципам квантовой механики, оказывает влияние на ход процесса. Поэтому вакуум следует рассматривать не как пустое пространство, а как среду со сложными свойствами. Электрон или нуклон, движущиеся в вакууме, окружены облаком порождаемых их движением виртуальных частиц, подобно квазичастицам в задаче многих тел.

Графики, описывающие взаимодействие элементарных частиц, по виду не отличаются от графиков задачи многих тел. Однако по существу имеются очень важные отличия. Прежде всего, поскольку явления происходят в вакууме, они не должны зависеть от выбора лоренцевой системы координат, что, как мы увидим, накладывает сильнейшие ограничения на характер взаимодействия и на функции Грина частиц. Кроме того, в квантовой теории поля мы имеем дело только с «квазичастицами». «Затравочные» или «голые» частицы так же, как затравочное взаимодействие, в этом случае ненаблюдаемы. Действительно, в этом случае, в отличие от задачи многих тел, нет возможности вынуть частицы и исследовать их свойства вне «среды». Между тем при построении квантовой теории поля приходится начинать с введения затравочных частиц и затравочных взаимодействий. Существенной чертой такой формулировки теории является появление расходящихся интегралов во всех выражениях, связывающих затравочную массу или затравочное взаимодействие с наблюдаемыми величинами. Эти расходимости являются, как мы увидим,

следствием одного из основных предположений квантовой теории поля — предположения о локальности взаимодействия. Локальность означает, что частицы взаимодействуют только когда совпадают их 4-мерные координаты. Любое взаимодействие на расстоянии рассматривается как вторичный эффект, возникающий в результате обмена одной или несколькими виртуальными частицами, испущенными и поглощенными в локальных актах.

Поскольку затравочные величины ненаблюдаемы, то расходимости выражений, содержащих эти величины, не являются аргументом против предположения о локальности взаимодействия, которое с большой точностью подтверждается на примере квантовой электродинамики (см. ниже).

Один из способов выйти из этого затруднения состоит в следующем. Можно так сформулировать теорию, чтобы она с самого начала содержала только наблюдаемые величины. При этом расходящиеся интегралы не появляются в расчетах, несмотря на локальность взаимодействия. Эту программу в принципе можно было бы провести с помощью дисперсионных соотношений. Поясним идею этого метода на простом примере, который к тому же поможет проследить причину расходимостей при локальном взаимодействии.

Рассмотрим амплитуду рассеяния двух нерелятивистских частиц с локальным (δ -образным) взаимодействием. Пусть взаимодействие соответствует отталкиванию, тогда отсутствуют связанные состояния. При δ -образном взаимодействии амплитуда рассеяния не зависит от углов (S -рассеяние).

Уравнение для амплитуды рассеяния в системе центра инерции можно записать в виде (стр. 234, $m = 1$)

$$f(p, p') = \lambda - 4\pi \int \frac{f(p, p_1) f(p_1, p')}{p^2 - p_1^2 + i\delta} \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}.$$

Здесь λ — борновская амплитуда, не зависящая в нашем случае от p и p' и играющая роль «затравочного» взаимодействия.

Предположим, что λ достаточно мала, и попытаемся получить f в виде ряда по степеням λ . Во втором порядке по λ получаем интеграл, линейно расходящийся на

верхнем пределе,

$$f^{(1)} = \lambda, \quad f^{(2)} = \lambda^2 \int \frac{d^3 p_1}{p^2 - p_1^2 + i\delta} \frac{1}{(2\pi)^3}.$$

Эта расходимость той же природы, что и расходимости в квантовой теории поля. Переход к релятивистским формулам, как мы увидим, только изменяет характер расходимости, и для бозе-частиц вместо линейной зависимости от верхнего предела получается логарифмическая, а для ферми-частиц — квадратичная. Математическая причина расходимости состоит в том, что интегральное уравнение для амплитуды с сингулярным при $p \rightarrow \infty$ ядром не допускает разложения в ряд по степеням λ . Таким образом, расходимости теории поля не содержат ничего таинственного, а являются естественным следствием локальности, которая приводит к интегрированию по бесконечному импульсному пространству. Если бы взаимодействие было нелокальным, то λ нельзя было бы выносить из-под интеграла и интегрирование по импульсам было бы обрезано величиной $1/r_0$, где r_0 — радиус взаимодействия.

Попробуем получить ряд не по степеням λ , а по степеням амплитуды, соответствующей какой-либо определенной энергии, скажем, энергии, равной нулю. Выразим амплитуду через ее мнимую часть (стр. 184, $p = p'$)

$$f(p) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{Im } f(p_1) dp_1^2}{p^2 - p_1^2}.$$

Как легко видеть из оптической теоремы (см. ниже формулу (b)), для сходимости ряда по степеням $f(0)$ необходимо улучшить сходимость подинтегрального выражения. Для этого вычтем из левой и правой частей $f(0)$. Получаем

$$f(p) = f(0) + \frac{p^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{Im } f(p_1) dp_1^2}{(p^2 - p_1^2) p_1^2}. \quad (\text{a})$$

Так как мнимая часть $f(p)$ согласно оптической теореме

$$\text{Im } f(p) = p |f(p)|^2 \quad (\text{b})$$

квадратично зависит от f , то формула (a) вместе с (b) дает возможность получать итерации по степеням $f(0)$.

Полагая в правой части (b) $f = f(0)$, получим

$$f(p) = f(0) + ip[f(0)]^2 + \dots$$

Для рассмотренного нами случая можно, как мы видели (стр. 184), получить и замкнутое выражение. Согласно (a) имеем

$$f(p) = \frac{f(0)}{1 - ipf(0)}.$$

Для получения ряда по степеням $f(0)$ нам пришлось переписать уравнение для амплитуды в форме (a), т. е. выделить слагаемое $f(0)$.

При переходе к релятивистской задаче в случае ферми-систем из-за более сильной расходимости нам пришлось бы для сходимости ряда по степеням $f(0)$ выделить, кроме слагаемого $f(0)$, еще слагаемое $\left(\frac{df}{dp^2}\right)_0 p^2$. В следующих приближениях степень расходимости увеличивается и количество вычитательных констант возрастает.

Несмотря на привлекательность дисперсионного подхода, он практически применим только в простейших случаях. В следующих приближениях релятивистской задачи увеличивается число частиц в промежуточных состояниях и возникают многочастичные амплитуды, приводящие к необозримым математическим трудностям.

Удобнее пользоваться следующим приемом. Расходящиеся интегралы обрезаются на некотором большом импульсе L (или на малом расстоянии r_0 , если расчет ведется в координатном представлении). Тогда, предполагая взаимодействие λ достаточно слабым, можно получить ряд теории возмущений по степеням λ . Оказывается, что расходящиеся части интегралов (зависящие от L) могут быть в каждом порядке теории возмущений выделены так, что после переопределения константы взаимодействия и констант, входящих в функции Грина, оставшиеся выражения уже нечувствительны к месту обрезания. В этом состоит идея перенормировок, с которыми мы сталкивались в задаче многих тел, — при переходе от частиц к квазичастицам приходилось переопределять массу и константы взаимодействия. Переход от затравочной константы λ к амплитуде $f(0)$ в рассмотренной выше задаче представляет собой пример перенормировки взаимодействия.

Для того чтобы теория имела физический смысл, необходимо, чтобы устранение расходимостей за счет переопределения констант можно было сделать во всех порядках теории возмущений. Оказывается, что это возможно не во всех теориях поля, т. е. что не все теории поля обладают свойством перенормируемости. Критерий перенормируемости определяется размерными соображениями. Для перенормируемости необходимо, чтобы константа взаимодействия была безразмерна или содержала длину в отрицательной степени. В случае константы, имеющей размерность, скажем, квадрата длины, степень расходимости интегралов будет расти с увеличением порядка теории возмущений. Действительно, так как масса частиц при больших импульсах не входит в задачу, то единственная безразмерная комбинация в n -м порядке будет $(\lambda L^2)^n$. Следовательно, степени расходимости растут с увеличением n , и, как мы увидим, неограниченно возрастает число констант, которые нужно переопределять или заново вводить для устранения расходимостей. Мы покажем, что это означает потерю локальности взаимодействия.

Таким образом, перенормируемость является критерием физически допустимого локального взаимодействия. Вопрос о перенормируемости по существу сводится к возможности так сформулировать теорию, чтобы взаимодействие при импульсах, много меньших, чем граница обрезания импульсов L , определялось импульсами виртуальных частиц, также много меньшими, чем L . Или, в координатном пространстве, чтобы взаимодействия на расстояниях $r \gg r_0$ определялись взаимодействиями виртуальных частиц также при $r \gg r_0$. Неудивительно, что такое требование выполняется не во всех теориях.

Для иллюстрации рассмотрим пример аналогичной ситуации в классической физике. Допустим, мы задаемся целью построить теорию, описывающую макроскопические движения жидкости или газа. Возникает вопрос, будут ли эти движения оставаться макроскопическими или будут рассыпаться на движения все более мелкого масштаба, пока не дойдут до атомных размеров? В тех случаях, когда применима гидродинамика, мы имеем пример такой «перенормируемой» теории — роль малых масштабов сводится к появлению в теории макроскопических констант вязкости и средней плотности.

Однако нельзя построить теорию, описывающую макроскопические движения, например, в ферми-газе. Движения не остаются макроскопическими, а распадаются на движения атомных масштабов.

При изучении свойств теории поля на малых расстояниях (или при больших импульсах) возникает еще один важный вопрос: является ли перенормируемая теория логически замкнутой, справедливы ли ее результаты при сколь угодно малых расстояниях?

В теориях перенормируемого типа взаимодействие между двумя частицами экранируется полем виртуальных частиц (о возможном исключении из этого правила см. стр. 334). В результате эффективное взаимодействие убывает с расстоянием. Если предположить, что затравочное взаимодействие достаточно мало, то можно рассчитать взаимодействие на любых расстояниях, пользуясь теорией возмущений. При этом оказывается, что взаимодействие на больших расстояниях полностью экранируется виртуальными частицами подобно экранировке сторонних зарядов электронами металла. Таким образом, частицы не должны взаимодействовать на больших расстояниях. Этот парадокс, подробно исследованный И. Я. Померанчуком, получил название «пуля заряда». В действительности это обстоятельство не является аргументом против логической замкнутости теории.

В случае квантовой электродинамики, если уменьшать расстояние между двумя зарядами, мы, несмотря на малость наблюдаемого заряда, обязательно приходим в область, где заряд оказывается порядка единицы и теория возмущений, на которой основан парадокс, перестает быть справедливой. Будет ли продолжаться рост заряда при меньших расстояниях? Если будет, то мы придем к бесконечному затравочному заряду, что означает физическую бессмысленность понятия затравочного заряда. Как мы увидим, этот вопрос до сих пор остается открытым.

Расстояния, на которых заряд $e^2(r)$ делается порядка 1, чрезвычайно малы, и вполне вероятно, что влияние слабых или гравитационных взаимодействий так изменит теорию, что рост заряда прекратится прежде, чем мы дойдем до области $e^2(r) \sim 1$. В этом случае вопрос о «нуле заряда» в электродинамике утратит физический интерес

и сохранит только теоретическое значение для выяснения структуры полевых теорий на малых расстояниях.

Дальнейшее изложение построено следующим образом. По существу рассматривается только одна из проблем квантовой теории поля — вопросы, связанные со структурой полевых теорий на малых расстояниях. Этот круг вопросов дает большие возможности для использования качественных методов. Конкретные задачи квантовой теории поля (вычисление радиационных поправок) связаны с громоздкими расчетами и, кроме того, превосходно изложены в других местах *). В первых разделах строится необходимый для нашей цели аппарат. Находятся уравнения и функции Грина, описывающие свободные частицы со спином 0, $1/2$ и 1. Уравнения и функции Грина для свободных частиц получаются как релятивистски инвариантная запись двух уравнений Шредингера и соответствующих функций Грина для частицы и античастицы. Общие свойства полевых теорий на малых расстояниях изучаются сначала на модели 4-бозонного взаимодействия. На простейших графиках двухчастичной амплитуды перехода поясняется природа расходимостей и идея перенормировок. Находится условие перенормируемости теории. Затем производится вычисление амплитуды рассеяния до 3-го порядка по константе взаимодействия. Анализ первых членов разложения приводит к идее о возможности получения точного выражения для амплитуды из требования независимости амплитуды от радиуса обрезания, т. е. из требования перенормируемости. Полученное выражение обладает свойством «нуля заряда». При достаточно малом затравочном заряде заряд на больших расстояниях стремится к нулю.

Далее рассматривается реалистическая теория — квантовая электродинамика. Сравнением с классической электродинамикой выясняется физический смысл поправок к функции Грина фотона. Определяется во втором порядке по e^2 поправка к закону Кулона, вызываемая поляризационными зарядами. После этих подготовительных задач

*) А. И. А х и с з е р, В. Б. Б е р е с т е ц к и й, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969.

Н. Н. Б о г о л ю б о в, Д. В. Ш и р к о в, Введение в теорию квантованных полей, «Наука», 1973.

с помощью простых физических соображений без разложения по e^2 находится исправленный закон Кулона, из которого выводится формула для взаимодействия частиц на произвольно малых расстояниях (формула Гелл-Манна — Лоу). Обсуждаются возможные границы применимости квантовой электродинамики *).

1. КОНСТРУИРОВАНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКИХ УРАВНЕНИЙ

При получении уравнений и функций Грина, описывающих частицы, определяющую роль играют условия симметрии, т. е. требование инвариантности относительно общих преобразований Лоренца, включающих повороты в пространстве — времени и отражения (требования четности и обратимости). Еще одно существенное условие, которое накладывается на уравнения, — это требование простоты. Так, например, отбираются уравнения с производными наименьшего порядка или, в случае внешнего поля, с наименьшим возможным числом параметров, определяющих взаимодействие частицы с полем. Требование простоты, или лучше сказать, красоты уравнений, не являясь абсолютным, сыграло важнейшую роль в отыскании законов природы.

Лоренц-инвариантность. Уравнения, описывающие движение частиц в пустом пространстве, должны быть лоренц-ковариантны, т. е. не должны менять своего вида при переходе в движущуюся систему координат по формулам Лоренца

$$t' = \frac{t + vr}{\sqrt{1 - v^2}}, \quad r' = \frac{r + vt}{\sqrt{1 - v^2}}.$$

Достаточно рассматривать бесконечно малые преобразования Лоренца, что мы и будем делать в дальнейшем,

$$t' = t + vr, \quad r' = r + vt, \quad v \rightarrow 0.$$

*) Изложение других вопросов теории поля, близкое к принятому в этой главе, содержится в книге: Р. Р. Фейнман «Theory of Fundamental processes» (W. A. Benjamin, Inc. 1961) и в лекциях В. И. Гривова «Квантовая электродинамика» (Материалы 9 Зимней школы ЛИЯФ, часть I, Ленинград, 1974 г.). Удивительно ясное изложение конкретных расчетов различных процессов содержится в книге Л. Б. Окуня «Слабое взаимодействие элементарных частиц», Физматгиз, 1963.

Преобразования Лоренца оставляют инвариантным интервал

$$(x_1 - x_2)^2 = (t_1 - t_2)^2 - (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$$

между двумя точками в пространстве — времени

$$(x_1 - x_2)^2 = (x'_1 - x'_2)^2 = \text{inv.}$$

Все величины классической теории представляют собой либо скаляры, либо 4-векторы и 4-тензоры, т. е. величины, преобразующиеся как произведение компонент 4-вектора $x_\mu = (t, \mathbf{r})$. Примерами служат: 4-вектор энергии — импульса $p_\mu = (E, \mathbf{p})$, 4-вектор тока $J_\mu = (\rho, \mathbf{j})$, тензор напряженности электромагнитного поля $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$, связанный с 4-вектором потенциала $A_\mu = (\phi, \mathbf{A})$, и т. д.

Все 4-векторы преобразуются по закону

$$A'_0 = A_0 + \mathbf{v} \mathbf{A}, \quad \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \mathbf{v} A_0.$$

Скалярное произведение любых 4-векторов инвариантно

$$(AB) \equiv A_0 B_0 - \mathbf{A} \mathbf{B} = (A' B') = \text{inv.}$$

Можно сохранить обычные правила умножения векторов, введя метрический тензор

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Тогда $AB = g_{\mu\nu} A_\mu A_\nu$. Вместо этого суммирование по греческим индексам будет пониматься в инвариантном смысле

$$AB \equiv A_\mu B_\mu \equiv A_0 B_0 - A_i B_i.$$

В некоторых случаях мы будем переходить к евклидовой метрике, вводя $A_4 = iA_0$. Такие векторы будем отмечать тильдой:

$$\tilde{A} \tilde{B} = \tilde{A}_\nu \tilde{B}_\nu = -AB.$$

В квантовой механике наблюдаемым величинам соответствуют операторы $\hat{V}$, характеризующиеся набором матричных элементов $V_{ij} = \langle \Psi_i^* | \hat{V} | \Psi_j \rangle$.

Матричные элементы должны преобразовываться так же, как и соответствующие классические величины, т. е.

как компоненты векторов или тензоров. Однако для Ψ -функций при этом возможен более сложный закон преобразования, поскольку они входят билинейно в матричные элементы. Аналогичная ситуация уже встречалась в нерелятивистской квантовой механике: при анализе инвариантности относительно 3-мерных вращений наряду с тензорами вводились также спиноры. Тензоры преобразуются как произведения 3-мерных координат, а спиноры — по более сложному закону, так что билинейные комбинации спиноров преобразуются как векторы и тензоры.

Например, для частицы со спином $1/2$ ее волновая функция $\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$ преобразуется как

$$\varphi' = \varphi + i \frac{\sigma n}{2} \theta \varphi \quad (6.1)$$

при повороте системы координат на малый угол θ вокруг оси n . (Здесь σ — матрицы Паули.) Билинейные комбинации $\varphi^\dagger \varphi$ и $\varphi^\dagger \sigma \varphi$ преобразуются, соответственно, как скаляр и 3-мерный псевдовектор — отсюда и был найден закон преобразования спинора.

Попытаемся найти закон лоренц-преобразования спинора. Поскольку матрицы Паули образуют полный набор, то этот закон должен бы быть аналогичным (6.1):

$$\varphi' = \varphi + c_1 \frac{\sigma v}{2} \varphi. \quad (6.2)$$

Соотношения (6.1) соответствуют преобразованию координат

$$x'_1 = x_1 + \theta x_2, \quad x'_2 = x_2 - \theta x_1. \quad (6.3)$$

(Для определенности рассмотрен поворот вокруг оси z по часовой стрелке.) Для того чтобы преобразование Лоренца

$$x'_3 = x_3 + vt, \quad t' = t + vx_3$$

при введении евклидовой метрики $it = x_4$ объединялось с формулой для поворота координат, необходимо взять $i\theta = \pm v$ (знак «+» или «—» зависит от выбора правой или левой системы пространственных координат). Поэтому для получения (6.2) следует в (6.1) заменить $i\theta$ на $\pm v$. Таким образом $c_1 = \pm 1$.

Имеется два возможных типа спиноров с преобразованием

$$\varphi'_+ = \varphi_+ + \frac{\sigma v}{2} \varphi_+, \quad \varphi'_- = \varphi_- - \frac{\sigma v}{2} \varphi_-. \quad (6.4)$$

Оба эти спинорных поля не имеют определенной четности, поскольку величина σv изменяет знак при отражении. При отражении φ_+ переходит в φ_- и наоборот. Эти поля описывают 2 двухкомпонентные частицы (например, нейтрино и антинейтрино). Из таких полей можно составить две линейные комбинации с определенной четностью

$$\varphi = \varphi_+ + \varphi_-, \quad \chi = \varphi_+ - \varphi_-.$$

Поле φ имеет четность, противоположную χ . Закон преобразования для этих величин получается из (6.4):

$$\varphi' = \varphi + \frac{\sigma v}{2} \chi, \quad \chi' = \chi + \frac{\sigma v}{2} \varphi. \quad (6.5)$$

Эти преобразования сохраняют свой вид при отражении.

Итак, требования лоренц-инвариантности и P -четности приводят к тому, что частица со спином $1/2$ должна описываться 4-компонентным спинором $\Psi = \begin{Bmatrix} \varphi \\ \chi \end{Bmatrix}$. Ниже мы увидим, что этот факт связан с существованием античастиц: четыре компоненты релятивистского спинора соответствуют двум проекциям спина частицы и двум — античастицы.

Пока что, не конкретизируя физического смысла спиноров φ и χ , мы можем составить из них билинейные комбинации, преобразующиеся как скаляры, векторы и тензоры при лоренц-преобразованиях. Ограничимся важными для дальнейшего случаями скаляра и вектора. Скаляр имеет вид

$$S = \varphi^+ \varphi - \chi^+ \chi.$$

Действительно, при лоренц-преобразовании каждый из членов $\varphi^+ \varphi$, $\chi^+ \chi$ приобретает одну и ту же добавку $1/2 (\chi^+ \sigma v \varphi + \varphi^+ \sigma v \chi)$, которая сокращается в S . Если составить вместо разности сумму

$$V_0 = \varphi^+ \varphi + \chi^+ \chi,$$

то добавки не сократятся, а удвоятся:

$$V'_0 = V_0 + vV.$$

Здесь

$$V_i = \chi^+ \sigma_i \varphi + \varphi^+ \sigma_i \chi. \quad (6.6)$$

Таким образом, V_0 преобразуется как четвертая компонента 4-вектора $V_\mu = (V_0, \mathbf{V})$. Нетрудно убедиться, что величины V_i преобразуются как пространственные компоненты 4-вектора V_μ . Действительно, подставляя (6.5) в (6.6), получим

$$V'_i = V_i + \frac{1}{2} v_k \chi^+ (\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i) \chi + \frac{1}{2} v_k \varphi^+ (\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i) \varphi.$$

Используя правила антикоммутации $\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i = 2\delta_{ik}$, мы приходим к правильному закону преобразования

$$V'_i = V_i + v_i V_0.$$

Найденные билинейные комбинации обычно записывают с помощью биспинора $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ и матриц Дирака

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix},$$

$$S = \Psi^+ \gamma_0 \Psi \equiv \bar{\Psi} \Psi, \quad V_\mu = \Psi^+ \gamma_0 \gamma_\mu \Psi \equiv \bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi.$$

Матрицы Дирака удовлетворяют соотношениям антикоммутации

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2g_{\mu\nu}.$$

Уравнения Максвелла. В качестве иллюстрации использования свойств симметрии покажем, как теоретик нашего времени восстановил бы уравнения Максвелла в пустоте, если бы они не были известны. Нам надо получить соотношения между электрическим полем $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ и магнитным полем $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$. Эти соотношения должны быть линейными вплоть до очень больших полей $\mathcal{E}$, $\mathcal{H} \sim \mathcal{E}_K \sim \sim 10^{16}$ в/см, которые определяются поляризацией вакуума (см. оценку на стр. 12). Прежде всего нам нужно найти характер симметрии полей $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$, что выясняется из простейших экспериментов, например, из экспериментов по отклонению пучка электронов в магнитном и электрическом полях. При этом на электрон действует

сила $\mathcal{F} = e\mathcal{E} + \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathcal{H}$, откуда следует, что величина $\mathcal{H}$ является псевдовектором (или аксиальным вектором). Это означает, что в отличие от векторных величин $\mathcal{H}$ не изменяется при операции зеркального отражения. Кроме того, так как $\mathcal{H}$ создается током, т. е. величиной, пропорциональной скорости заряженных частиц, то магнитное поле изменяет знак при операции обращения времени. Между тем электрическое поле $\mathcal{E}$ является вектором и, поскольку оно может быть создано неподвижными зарядами, инвариантно относительно обращения времени. Тогда уравнения наинизшего порядка, связывающие $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$, будут

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = a \operatorname{rot} \mathcal{H}, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = b \operatorname{rot} \mathcal{E}.$$

Действительно, $\operatorname{rot} \mathcal{H}$ — единственная величина, не изменяющая знак при отражении и меняющая знак при замене t на $-t$. Слагаемое вида $\mathbf{r} \times \mathcal{H}$ противоречило бы трансляционной симметрии пространства. Аналогично исключаются и все другие возможности.

Мы не включили в уравнение производные более высокого порядка. Их включение привело бы к введению дополнительных констант и нарушило бы красоту теории. Кроме того, введение более высоких производных по координатам заставило бы также ввести и более высокие производные по времени, иначе нарушилась бы симметрия координат и времени, диктуемая релятивистской инвариантностью. Тогда значение полей $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$ в момент времени t определялось бы не только их значением в начальный момент, но и значением их производных по времени.

Обе введенные выше константы имеют размерность скорости, причем одну из них можно выбрать произвольно. Это определит относительные единицы измерения $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$. Положим $b = c$ (c — скорость света). Тогда, исключая $\mathcal{H}$ из уравнений, находим ($\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathcal{E} = -\Delta \mathcal{E} + \nabla \operatorname{div} \mathcal{E} = -\Delta \mathcal{E}$)

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial t^2} = -ac \Delta \mathcal{E}.$$

Для того чтобы скорость распространения волн была равна c , необходимо $a = -c$, после чего наши уравнения превращаются в уравнения Максвелла. Из требования

релятивистской инвариантности мы могли бы найти закон преобразования $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$, компенсирующий лоренцево преобразование координат так, чтобы вид уравнений не изменялся. Удобнее это сделать, введя 4-вектор A_ν :

$$E_i = \dot{A}_i - \partial_i A_0, \quad \mathcal{H} = \text{rot } A, \quad (c \equiv 1),$$

$$\square A_\nu - \partial_\nu \partial_\mu A_\mu = 0, \quad \square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta,$$

откуда очевиден 4-векторный характер A_ν . Таким образом, $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$ преобразуются как компоненты четырехмерного тензора $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$.

Уравнение Клейна — Гордона — Фока. Получим лоренц-инвариантное уравнение, описывающее частицу со спином, равным нулю. Число компонент волновой функции со спином j в системе покоя определяется числом проекций j на фиксированную ось, т. е. равно $2j + 1$. В нашем случае функция должна быть однокомпонентной. Как мы увидим, изучая функции Грина в поле (см. следующий раздел), невозможно построить релятивистски инвариантную теорию только для частиц: в теорию с необходимостью должны входить античастицы с той же массой, которые вместе с частицами описываются единым уравнением. Получим это уравнение.

Волновые функции частицы и античастицы в (p, t) -представлении подчиняются уравнениям

$$i \frac{\partial \Psi_+(P)}{\partial t} = E(p) \Psi_+(p), \quad i \frac{\partial \Psi_-(P)}{\partial t} = E(p) \Psi_-(p), \quad (6.7)$$

где

$$E(p) = \sqrt{p^2 + m^2}.$$

Введем функции

$$\Psi = \Psi_+ + \Psi_-^*, \quad \Psi_1 = \Psi_+ - \Psi_-^*,$$

тогда из (6.7) получаем

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E(p) \Psi_1, \quad i \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = E(p) \Psi.$$

Исключая Ψ_1 , имеем

$$-\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = (p^2 + m^2) \Psi.$$

В координатном представлении получаем уравнение

Клейна — Гордона — Фока

$$(\square + m^2) \Psi = 0. \quad (6.8)$$

Из определения $\Psi(p, t)$ видно, что слагаемые $\Psi(r, t)$ с отрицательными частотами соответствуют частицам, а слагаемые с положительными частотами описывают античастицы. Уравнение (6.8) релятивистски инвариантно, что сразу видно в p -представлении: $(p_0^2 - p^2 - m^2) \Psi = 0$. Умножая (6.8) на Ψ^* и вычитая уравнение для Ψ^* , умноженное на Ψ , получаем уравнение неразрывности

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

где ρ и j_α образуют четырехмерный ток

$$j_\nu = \frac{1}{i} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x_\nu} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x_\nu} \right).$$

Плотность ρ дается выражением

$$j_0 = \rho(r, t) = \frac{1}{i} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right),$$

в (p, t) -представлении

$$\rho(p) = 2E(p) (\Psi_-^*(p) \Psi_-(p) - \Psi_+^*(p) \Psi_+(p)).$$

Таким образом, величина ρ имеет смысл разности плотностей частиц и античастиц, а уравнение неразрывности выражает сохранение разности чисел частиц и античастиц. В отсутствие поля, разумеется, сохраняется каждое из этих чисел. Для заряженных частиц уравнение неразрывности, очевидно, должно соответствовать сохранению заряда и, следовательно, заряд античастиц отличается только знаком от заряда частиц.

Итак, уравнение (6.8) представляет собой релятивистски инвариантную форму записи двух уравнений Шредингера (6.7), удобную для дальнейшего введения поля.

Уравнение Дирака. Наша задача — получить релятивистски инвариантное уравнение, описывающее частицу со спином $1/2$. Как уже говорилось при получении уравнения Клейна — Гордона — Фока, это невозможно сделать с помощью поля одной частицы. Необходимо составить единое уравнение, описывающее частицу и античастицу.

Для определенности будем говорить об электроне и позитроне.

Рассмотрим сначала уравнение в системе покоя. Тогда для электрона и позитрона получаются два независимых уравнения

$$i \frac{\partial \Psi_+}{\partial t} = m \Psi_+, \quad i \frac{\partial \Psi_-}{\partial t} = m \Psi_-.$$

Каждая из этих функций двухкомпонентна в соответствии с двумя возможными проекциями спина.

Обозначим $\Psi_+ = \varphi$, $\Psi_-^* = \chi$ и введем 4-компонентную функцию $\Psi = \begin{Bmatrix} \varphi \\ \chi \end{Bmatrix}$. Уравнение для Ψ приобретает вид

$$i \gamma_0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} = m \Psi. \quad (6.9)$$

Теперь надо написать лоренц-инвариантное уравнение, содержащее компоненты оператора импульса $p_\mu = -i \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ и переходящее при $p_i \Psi = 0$ в (6.9). Мы уже знаем, что величина $\bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi$ — это 4-вектор, а $\bar{\Psi} \Psi$ — скаляр. Отсюда следует, что величина $A_\mu \gamma_\mu \Psi$ преобразуется так же, как Ψ , если A_μ — 4-вектор. (Умножение этой величины слева на $\bar{\Psi}$ дает скаляр, так же как умножение $\bar{\Psi}$ на Ψ .) В данном случае в нашем распоряжении есть только 4-вектор $i p_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right)$. Поэтому мы приходим к уравнению Дирака

$$i \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \Psi = m \Psi. \quad (6.10)$$

Умножая уравнение, эрмитовски сопряженное к (6.10), справа на γ_0 и используя свойства γ_μ , получаем уравнение для $\bar{\Psi}$

$$-i \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\mu} \gamma_\mu = m \bar{\Psi}. \quad (6.11)$$

Умножая (6.10) слева на $\bar{\Psi}$, а (6.11) справа на Ψ и вычитая одно из другого, получаем уравнение неразрывности

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi = 0. \quad (6.12)$$

Ниже мы увидим, что $\bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi$ имеет смысл 4-тока.

В импульсном представлении

$$\hat{p}\Psi \equiv \gamma_\mu p_\mu \Psi = m\Psi. \quad (6.13)$$

Применяя это уравнение дважды, получаем

$$\hat{p}^2\Psi = p^2\Psi = m^2\Psi,$$

откуда

$$p^2 = \omega^2 - \mathbf{p}^2 = m^2.$$

Это уравнение имеет два решения: $\omega = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$. Положительные частоты соответствуют частицам, а отрицательные — античастицам. Это, конечно, не означает, что энергия E античастиц отрицательна — просто в Ψ входит комплексно сопряженная волновая функция античастицы, так что вместо множителя e^{-iEt} появляется множитель e^{iEt} , т. е. отрицательная частота.

Комплексное сопряжение нам понадобилось для того, чтобы получить в (6.9) матрицу γ_0 , что позволило написать ковариантное уравнение.

Уравнение Дирака устанавливает связь между первыми и вторыми компонентами Ψ . Имеем из (6.13)

$$(E(\mathbf{p}) - m)\varphi = \sigma \mathbf{p} \chi, \quad (E(\mathbf{p}) + m)\chi = \sigma \mathbf{p} \varphi. \quad (6.14)$$

Запишем $\Psi(x)$ для плоской волны в виде

$$\Psi_p^{(\sigma)}(\alpha, x) = u_\alpha^{(\sigma)} e^{ipx}. \quad (6.15)$$

Здесь значок σ определяет знак энергии и знак проекции спина, т. е. определяет «название» функции, тогда как значок α — спинорная переменная, определяющая номер компоненты. Из (6.14) находим $u_\alpha^{(\sigma)}$, нормированную так, что $\bar{u}u = 1$:

$$u^{(+)\sigma} = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \left\{ \begin{array}{c} \varphi^{(s)} \\ \frac{\sigma \mathbf{p}}{E+m} \varphi^{(s)} \end{array} \right\},$$

$$u^{(-)\sigma} = \sqrt{\frac{|E|+m}{2m}} \left\{ \begin{array}{c} -\frac{\sigma \mathbf{p}}{|E|+m} \chi^{(s)} \\ \chi^{(s)} \end{array} \right\}, \quad (6.16)$$

где $\varphi^{(s)}$ — спинор, соответствующий двум проекциям спина $(\varphi^{(s)}, \varphi^{(s')}) = \delta_{ss'}$. В системе покоя $\Psi^{(\sigma)}(x)$ для

$E(p) > 0$ переходит в $\Psi^{(+s)} = \begin{Bmatrix} \Psi_+^{(s)} \\ 0 \end{Bmatrix}$, а для $E(p) < 0$ в $\Psi^{(-s)} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \Psi_-^{(s)*} \end{Bmatrix}$.

Из (6.16) следует, что функция $u^{(-s)}(p, \alpha)$ описывает позитрон с импульсом $-p$.

Наиболее существенное следствие уравнения Дирака — это предсказание античастиц с той же массой, что и частица, но с противоположной четностью. До тех пор, пока нет внешних полей или взаимодействия, частицы и античастицы распространяются независимо, и уравнение Дирака представляет собой просто компактную запись уравнения Шредингера и условия лоренц-ковариантности.

Преимущества уравнения Дирака будут видны ниже, когда будет введено взаимодействие.

Функция Грина бесспиновых частиц. Функция Грина свободной частицы в (p, τ) -представлении имеет вид (стр. 214)

$$G^+(p, \tau) = e^{-iE^+(p)\tau} \theta(\tau),$$

где $E^+(p) = \sqrt{m_+^2 + p^2}$.

В фурье-представлении по τ имеем (стр. 214)

$$G^+(p, p_0) = \frac{1}{p_0 - E^+(p) + i\delta}.$$

Это выражение релятивистски не ковариантно. Действительно, функция Грина $G(p, p_0)$ должна быть ковариантна при лоренц-преобразованиях 4-вектора (p, p_0)

$$p' = p + vp_0, \quad p'_0 = p_0 + vp.$$

Между тем стоящая рядом с p_0 величина $E^+(p)$ при таком преобразовании изменяется по закону

$$E'(p) = E(p') = E(p) + vp \frac{p_0}{E(p)}.$$

Для того чтобы получить ковариантное выражение, необходимо допустить существование еще одной частицы с функцией Грина

$$G^-(p, \tau) = e^{-iE^-(p)\tau} \theta(\tau), \quad E^- = \sqrt{m_-^2 + p^2}$$

и ввести, так же как мы это делали выше (стр. 218), функцию Грина, определенную для всех τ :

$$G_1(p, \tau) = \begin{cases} G^+(p, \tau), & \tau > 0, \\ G^-(p, -\tau), & \tau < 0. \end{cases} \quad (6.17)$$

Тогда

$$-G_1(p, p_0) = \frac{1}{E^+(p) - p_0 - i\delta} + \frac{1}{E^-(p) + p_0 - i\delta}.$$

Для того чтобы это выражение имело ковариантную форму, необходимо предположить, что $E^+(p) = E^-(p) = E(p)$, т. е. что масса второй частицы равна массе первой ($m_+ = m_- = m$)

$$G_1(p, p_0) = - \frac{2E(p)}{E^2(p) - p_0^2 - i\delta}. \quad (6.18)$$

В знаменателе стоит инвариант $p^2 + m^2 - p_0^2$.

Введем инвариантную величину $G(p) = G_1(p)/2E(p)$. Заметим, что $G(p)$ является функцией Грина уравнения Клейна — Гордона — Фока (КГФ), описывающего частицу с нулевым спином

$$\begin{aligned} \square \Psi + m^2 \Psi &= 0, \\ (\square + m^2) G(x, x') &= \\ &= -i\delta(x - x'), \quad x = (r, t). \end{aligned} \quad (6.19)$$

Действительно, в 4-импульсном представлении

$$G(p) = \frac{1}{p^2 - m^2 + i\delta}, \quad (6.19')$$

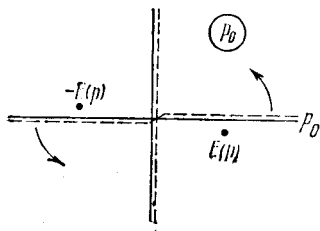


Рис. 49.

что совпадает с $G = G_1/2E(p)$.

В некоторых случаях удобно пользоваться функцией Грина в координатном представлении. Обозначая $x_1 - x_2 = x$, получим:

$$G(x_1 - x_2) = G(x) = i \int \frac{e^{-ipx}}{p^2 - m^2 + i\delta} \cdot \frac{d^4 p}{(2\pi)^4}.$$

Для вычисления этого интеграла удобно перейти к евклидовым переменным, введя $p_4 = ip_0$, $x_4 = ix_0$. Из приведенного рисунка (рис. 49) видно, что такой поворот контура

интегрирования в комплексной плоскости можно сделать, не задевая особых точек подинтегрального выражения (ниже мы рассматриваем такой поворот более подробно).

Используя соотношение

$$\frac{1}{\bar{p}^2 + m^2} = \int_0^\infty e^{-\alpha(\bar{p}^2 + m^2)} d\alpha, \quad \bar{p}^2 = p^2 + p_4^2 = -p^2,$$

получаем

$$\begin{aligned} G(x) &= \int_0^\infty e^{-\alpha m^2} d\alpha \prod_{i=1}^4 \left(\int \exp(-\alpha p_i^2 + i p_i x_i) \left(\frac{dp_i}{2\pi} \right) = \right. \\ &= \frac{1}{(4\pi)^2} \int_0^\infty du \exp \left\{ -\frac{\tilde{x}^2}{4} u - \frac{m^2}{u} \right\}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

На больших расстояниях с помощью метода перевала, разлагая показатель, получаем ($\tilde{x} = \sqrt{x_i^2}$)

$$-\frac{\tilde{x}^2}{4} u - \frac{m^2}{u} = -m\tilde{x} - \frac{\tilde{x}^3}{8m} (u - u_1)^2, \quad u_1 = 2m/\tilde{x},$$

откуда

$$G(x) \simeq \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{\frac{2\pi m}{\tilde{x}^3}} e^{-m\tilde{x}}, \quad \tilde{x} \gg 1/m. \quad (6.21)$$

В случае малых x можно пренебречь m^2 в показателе, и (6.20) дает

$$G(x) = \frac{1}{4\pi^2 \tilde{x}^2} = -\frac{1}{4\pi^2 x^2}. \quad (6.22)$$

Очень простой вид имеет функция Грина в смешанном представлении (r, p_0) . Из уравнения (6.19) получаем

$$\Delta G(p_0, r) + (p_0^2 - m^2) G(p_0, r) = \delta(r),$$

откуда

$$G(p_0, r) = -\frac{1}{4\pi r} \exp [i(p_0^2 - m^2)^{1/2} r]. \quad (6.23)$$

Выбор знака «+» в экспоненте заменяет правило обхода полюса в импульсном представлении.

Функция Грина частицы со спином $1/2$. Получим сначала функцию Грина в системе, в которой частица и античастица покоятся, тогда их функции Грина в τ -представлении

имеют одинаковый вид

$$G_{ss'}^+(\tau) = e^{-im\tau} \theta(\tau) \delta_{ss'}, \quad G_{ss'}^-(\tau) = e^{-im\tau} \theta(\tau) \delta_{ss'},$$

где s, s' — спинные значки.

Введем, как это уже делалось выше (стр. 218), объединенную функцию

$$G_{ss'}(\tau) = \begin{cases} G_{ss'}^+(\tau), & \tau > 0, \\ -G_{ss'}^-(\tau), & \tau < 0. \end{cases}$$

Переходя от τ -к p_0 -представлению, можно записать G в виде матричного элемента 4-рядной матрицы

$$G(p_0) = \begin{pmatrix} I \frac{p_0 + m}{p_0^2 - m^2 + i\delta} & 0 \\ 0 & -I \frac{p_0 - m}{p_0^2 - m^2 + i\delta} \end{pmatrix},$$

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

Выражение в верхнем левом углу соответствует частице, а в нижнем правом — античастице. Иными словами, мы представляем $G_{ss'}$ как $G_{ss'} = \bar{\Psi}_s G \Psi_{s'}$, где $\Psi_s = \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \chi_s \end{pmatrix}$ — биспинор, описывающий частицу и античастицу со спином s , $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma_0$. Перепишем $G(p_0)$ в виде

$$G(p_0) = \frac{\gamma_0 p_0 + m}{p_0^2 - m^2 + i\delta}.$$

Для того чтобы получить $G(p)$ в любой системе координат, необходимо записать G в инвариантной форме. Для этого в знаменателе рядом со скаляром m^2 следует вместо p_0^2 подставить 4-мерный скаляр $p^2 = p_0^2 - \mathbf{p}^2$, а в числителе вместо $\gamma_0 p_0$ — скаляр $\gamma_\nu p_\nu$. Скалярный характер этого произведения следует из того, что матричные элементы $\bar{\Psi} \gamma_\nu \Psi$ образуют 4-вектор. Таким образом, получаем

$$G(p) = \frac{\hat{p} + m}{p^2 - m^2 + i\delta}, \quad (6.24)$$

где $\hat{p} = \gamma_\nu p_\nu$. Матричные элементы G следует понимать в смысле $\bar{\Psi}_1 G \Psi_2$. Выражение (6.24) совпадает с функцией

Грина уравнения Дирака, определенной соотношением

$$(\hat{p} - m)G = I, \quad G = \frac{1}{\hat{p} - m} = \frac{\hat{p} + m}{p^2 - m^2}.$$

Найдем G в координатном представлении

$$G(x) = i \int e^{-ipx} \frac{\hat{p} + m}{p^2 - m^2} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} = (m + i\gamma_\nu \partial_\nu) G_s. \quad (6.25)$$

где G_s — функция Грина скалярной частицы (6.20). При $m^2 x^2 \ll 1$ получаем

$$G(x) = \frac{i}{2\pi^2} \frac{\gamma_\nu x_\nu}{x^4}. \quad (6.26)$$

Таким образом, $G(p)$ представляет собой матрицу $G_{\alpha\beta}(p)$ в пространстве спинорной переменной α . Переход к σ -представлению осуществляется с помощью функции $u^{(\sigma)}(\alpha)$, введенной на стр. 289. Для внутренних частей диаграмм удобнее пользоваться α -представлением (см. ниже).

Функция Грина фотона. При описании скалярных и спинорных частиц мы исходили из уравнения Шредингера и, пользуясь лоренц-инвариантностью, находили релятивистские уравнения и соответствующие функции Грина.

В случае квантов электромагнитного поля — фотонов — исходным пунктом являются лоренц-инвариантные уравнения Максвелла. Нам нужно найти квантовомеханическую интерпретацию этих уравнений.

Наложим на вектор-потенциал условие Лоренца

$$\partial_\mu A_\mu = 0. \quad (6.27)$$

Тогда уравнение Максвелла сводится к четырем уравнениям КГФ для каждой из компонент A_μ

$$\square A_\mu = 0. \quad (6.28)$$

Таким образом мы можем интерпретировать $A_\mu(x)$ как волновую функцию бозе-частицы с нулевой массой. Векторный значок μ соответствует проекциям спина этой частицы.

В случае частицы с массой, отличной от нуля, для определения спина частицы можно перейти в систему покоя — число компонент волновой функции в этой системе равно $2j + 1$. Для фотона системы покоя не существует. В этом

случае для определения спина можно использовать калибровочную инвариантность: поля A_μ и $A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu f$, где f — произвольная функция координат и времени, физически неразличимы и описывают одну и ту же частицу. В любой фиксированной системе координат можно так выбрать функцию f , чтобы A_0 равнялось нулю во всех точках пространства — времени, тогда A_μ превращается в трехмерный вектор $\mathbf{a}$, следовательно, описывает частицу со спином 1. Однако условие Лоренца оставляет только две независимые проекции спина, которые соответствуют двум поляризациям электромагнитной волны

$$A_\mu(x) = e_\mu^{(1,2)}(ae^{ikx} + a^*e^{-ikx}). \quad (6.29)$$

Здесь первое слагаемое отвечает волновой функции фотона, а второе представляет собой комплексно сопряженную волновую функцию антифотона. Так как поле A_μ вещественно, то антифотон тождественно совпадает с фотоном, и ток, отвечающий сохранению разности чисел частиц и античастиц, равен нулю. Волновая функция, описывающая 1 фотон в единице объема, соответствует в (6.29) $a = 1/\sqrt{2k_0}$ (см. замечания на стр. 320).

Векторы $e_\mu^{(\lambda)}$ можно выбрать ортонормированными

$$e_\mu^{(\lambda)} e_\mu^{(\lambda')} = \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Кроме того, $e_\mu^{(\lambda)}$ подчиняются условию «поперечности»

$$k_\mu e_\mu^{(\lambda)} = 0.$$

Так, например, при A_0 , равном нулю, направляя ось z по k , получим

$$e_\mu^{(1)} = (0, 1, 0, 0), \quad e_\mu^{(2)} = (0, 0, 1, 0).$$

Теперь мы можем построить функцию Грина фотона как функцию Грина частицы, удовлетворяющей уравнению КГФ.

В представлении (λ, k)

$$D_{\lambda\lambda'}(k) = \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{k^2 + i\delta}. \quad (6.30)$$

Для того чтобы записать это выражение в ковариантной форме, поступим аналогично тому, как это делалось при

получении функции Грина спинорной частицы, а именно, введем 4-рядную матрицу $D_{\mu\nu}$, такую, чтобы ее матричные элементы давали величину $D_{\lambda\lambda'}$:

$$D_{\lambda\lambda'} = e_{\mu}^{(\lambda)} D_{\mu\nu} e_{\nu}^{(\lambda')}. \quad (6.31)$$

Из этого условия $D_{\mu\nu}$ определяется неоднозначно, а с точностью до продольного члена $(d(k^2) - 1) k_{\mu} k_{\nu} / k^2$

$$D_{\mu\nu}(k) = \frac{g_{\mu\nu} + (d(k^2) - 1) k_{\mu} k_{\nu} / k^2}{k^2 + i\delta}. \quad (6.32)$$

Продольный член не вносит вклада в (6.31) в силу условия поперечности, а член $g_{\mu\nu}$ дает (6.30) благодаря ортонормированности функции $e_{\mu}^{(\lambda)}$. Калибровочную функцию $d(k^2)$ в (6.32) можно выбирать, исходя из удобства промежуточных вычислений. В окончательных ответах d сократится благодаря калибровочной инвариантности. Обычно выбирают $d(k^2) = 1$.

Этот результат мы могли бы получить и другим путем. Можно было бы ввести векторную частицу с массой m , а затем перейти к случаю фотона, устремляя массу к нулю. Функция Грина векторной частицы в системе покоя имеет вид, совпадающий с (6.30), но в отличие от фотона имеются 3 значения поляризации и соответственно 3 орта $e_{\mu}^{(\lambda)}$. Нам нужно найти 4-тензорное выражение $D_{\mu\nu}^{(m)}$, матричные элементы которого в системе покоя дают $D_{\lambda\lambda'}^{(m)}$

$$e_{\mu}^{(\lambda)} D_{\mu\nu}^{(m)} e_{\nu}^{(\lambda')} = \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{k_0^2 - m^2}.$$

Отсюда, аналогично (6.32), следует

$$D_{\mu\nu}^{(m)} = \frac{1}{k^2 - m^2} \left(g_{\mu\nu} - \frac{k_{\mu} k_{\nu}}{m^2} \right). \quad (6.33)$$

Для того чтобы перейти к случаю $m \rightarrow 0$, необходимо предположить, что продольные компоненты $D_{\mu\nu}$ (второе слагаемое в скобке) не входят в наблюдаемые выражения. Это и соответствует калибровочной инвариантности. Таким образом, калибровочная инвариантность представляет собой неизбежное следствие равенства нулю массы фотона.

Поскольку введенная нами величина $D_{\mu\nu}$ представляет собой функцию Грина уравнения Даламбера

$$\square D_{\mu\nu} = -ig_{\mu\nu}\delta(x-x'),$$

то с помощью $D_{\mu\nu}$ определяется классическое поле A_μ^{ex} , вызываемое током j_μ^{ex}

$$\square A_\mu^{\text{ex}} = j_\mu^{\text{ex}},$$

откуда

$$A_\mu^{\text{ex}}(x) = i \int D_{\mu\nu}(x-x') j_\nu^{\text{ex}}(x') d^4x'. \quad (6.34)$$

В частности, для поля неподвижного заряда e имеем $j_0 = e\delta(\mathbf{r})$, $A_0^{\text{ex}} = ie \int D_{00}(\mathbf{r}, t-t') dt'$. Отсюда, используя выражения функции Грина бесспиновых частиц с $m=0$, получаем

$$-i \int D(\tau, \mathbf{r}) d\tau \equiv D_{00}(\omega=0, \mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi r}, \quad A_0^{\text{ex}} = \frac{e}{4\pi r}. \quad (6.35)$$

2. РАСХОДИМОСТИ И ПЕРЕНОРМИРУЕМОСТЬ

Используя функции Грина, найденные в предыдущем разделе, и введя взаимодействие между частицами, можно приступить к выяснению природы расходимостей в теории поля и к устранению этих расходимостей за счет переопределения констант, входящих в теорию. Эти вопросы будут сначала выяснены на простейшей модели квантовой теории поля — на модели 4-бозонного взаимодействия.

Локальное взаимодействие между частицами. В этом разделе будут рассмотрены возможные типы взаимодействия между частицами и будет выбрана простейшая модель, которая ниже будет использована для исследования свойств квантовой теории поля на малых расстояниях.

Квантовая теория поля исходит из предположения о локальном взаимодействии частиц. Это означает, что частицы взаимодействуют только, когда их пространственные и временные координаты совпадают*). Наблюдающееся на опыте взаимодействие на расстоянии рассматривается как вторичный процесс, возникающий в результате испускания и поглощения виртуальных частиц взаимодей-

*) Мы не рассматриваем здесь попыток построения нелокальных теорий, которые пока не дали реальных результатов.

ствующими частицами, причем акты испускания и поглощения локальны. Если взаимодействие таково, что в локальном акте рождается одна частица, то процесс рассеяния частиц описывается графиком рис. 50, а.

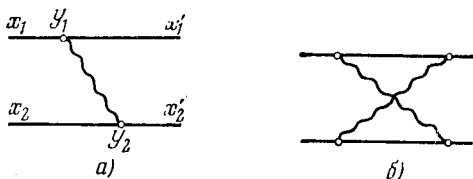


Рис. 50.

Частица 1 от x_1 до y_1 двигалась свободно. В точке y_1 была испущена какая-либо частица, которая в точке y_2 поглотилась частицей 2. В случае электродинамики испускаемая частица — квант. Кулоновское взаимодействие, таким образом, есть результат обмена виртуальным квантом. В случае ядерного взаимодействия двух нуклонов такой виртуальной частицей является π -мезон или какая-либо другая частица, сильно взаимодействующая с нуклонами (такие частицы, по предложению Л. Б. Окуня, объединяются названием «адрон»). Взаимодействие на расстоянии осуществляется и более сложными процессами — например, изображенным на рис. 50, б. В случае электродинамики такой процесс приведет лишь к малой добавке к кулоновскому взаимодействию, поскольку взаимодействие электронов с электромагнитным полем характеризуется малым безразмерным параметром $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$. В случае сильных взаимодействий соответствующий безразмерный параметр не мал и графики типа 50, б должны учитываться наряду с более сложными графиками, в которых участвует большое число виртуальных частиц.

Когда в локальном акте испускаются 2 частицы, взаимодействие на расстоянии описывается графиком рис. 51. Такой случай осуществляется в слабых взаимодействиях. На рис. 51 изображен процесс слабого взаимодействия двух нуклонов. Это взаимодействие осуществляется за счет обмена двумя частицами: электроном и антинейтрино. Таким образом, требование локальности состоит в том, что между актами взаимодействия частицы двигаются

свободно, а размер (четырёхмерный) области взаимодействия предполагается равным нулю. Такое простое и красивое предположение приводит к серьёзным трудностям: интегралы по пространству, описывающие некоторые процессы, оказываются расходящимися за счёт интегрирования по области малых расстояний между актами взаимодействия, или, если вычисление ведётся в импульсном представлении, за счёт больших импульсов виртуальных частиц. Это означает, что используемые нами методы описания квантовых систем неприменимы на малых расстояниях. Непротиворечивое описание систем в малых областях пространства — времени, возможно, потребует фундаментального пересмотра наших понятий.

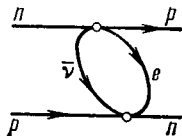


Рис. 51.

Однако, оставляя в стороне эту нерешенную задачу, можно попытаться построить теорию, пригодную в тех случаях, когда изучаются процессы, протекающие в четырёхмерных областях много больших, чем четырёхмерный интервал t_0 , определяющий границу применимости теории. Подобным образом построены все макроскопические теории. Например, построение электродинамики в среде для полей, медленно изменяющихся во времени и пространстве по сравнению с атомными масштабами, не требует знания атомной механики, а требует только введения диэлектрической и магнитной восприимчивостей.

Для проведения такой программы требуется прежде всего ясно понять природу и характер расходимостей, возникающих в теории. Этот фундаментальный вопрос не обязательно изучать на реально существующих частицах и взаимодействиях. Целесообразно рассмотреть его сначала на простейшей модели теории поля для одного типа частиц. Самое простое локальное взаимодействие соответствует рис. 52. Однако такая теория, как легко видеть, неустойчива по отношению к рождению бесконечного числа частиц. Действительно, для взаимодействия такого типа плотность энергии имеет вид $m^2\phi^2 + g\phi^3$. При любом знаке g энергия неограниченно понижается при $g\phi \rightarrow -\infty$. В результате возникают расходимости, не имеющие отношения к тем, которые нам следует изучить. Простейшая разумная теория соответствует скаляр-

ным частицам с локальным взаимодействием, изображенным на рис. 53. Для того чтобы такая теория была устойчивой, необходимо, чтобы константа, характеризующая

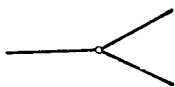


Рис. 52.

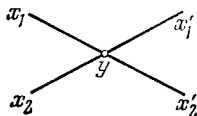


Рис. 53.

взаимодействие, соответствовала отталкиванию частиц. Слагаемое в энергии поля, соответствующее рис. 53, имеет вид $\lambda\phi^4$. Для устойчивости требуется $\lambda > 0$, что и соответствует отталкиванию.

Заметим, что в теории, описывающей два типа частиц (фермионы и бозоны), взаимодействие, изображенное на рис. 54, не приводит к неустойчивости (волнистая линия соответствует бозону). Такое взаимодействие соответствует члену в энергии вида $g\bar{\Psi}^+ \bar{\Psi}\phi$. Так как фермионы в силу принципа Паули не могут накапливаться в большом количестве, то

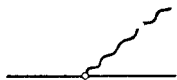


Рис. 54.

простое рассуждение, приведенное выше, в этом случае неприменимо. Взаимодействие такого типа используется в теории сильного взаимодействия элементарных частиц. Это же замечание относится и к электродинамике (см. стр. 318).

Графики Фейнмана в скалярной теории. Выясним, как должна вычисляться двухчастичная функция Грина в модели 4-бозонного взаимодействия, т. е. найдем аналитическое соответствие простейшим графикам, входящим в эту амплитуду перехода. Тем самым будут найдены правила расшифровки любых диаграмм, состоящих из этих простейших элементов.

Амплитуда простейшего процесса имеет вид (рис. 53)

$$A(x_1, x_2, x_3, x_4) = \int d^4y G(x_1 - y) G(x_2 - y) (-i\hat{V}_y) G(y - x_3) G(y - x_4).$$

Оператор взаимодействия $\hat{V}_y$ не должен явно зависеть от точки y — это нарушало бы однородность пространства и привело бы к несохранению энергии и импульса, поскольку

эти законы сохранения являются прямым следствием однородности времени и пространства. Вообще говоря, можно включить в $\hat{V}_y$ зависимость от градиентов:

$\hat{V}_y = V \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)$, где $\partial/\partial y$ действует на какую-либо из четырех функций распространения.

Мы рассмотрим простейший вариант теории поля, не содержащий градиентов, т. е. положим $V = \lambda$. Теория имеет смысл только при $\lambda > 0$. Диаграмма рис. 53 соответствует наинизшему приближению теории возмущений по λ , которое справедливо при $\lambda \ll 1$.

Кроме диаграммы рис. 53, согласно принципу суперпозиции, в амплитуду перехода вносят вклад всевозможные диаграммы, соответствующие различным промежуточным состояниям.

Во втором порядке по λ возможны три следующих графика (рис. 55). Эти три диаграммы отличаются перестановками наружных точек x_1, x_2, x_3, x_4 , так что сумма

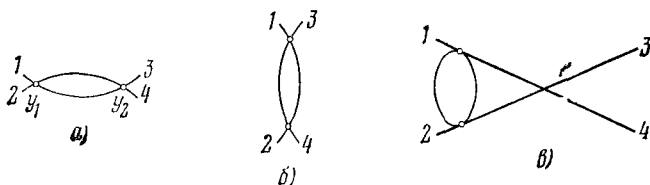


Рис. 55.

диаграмм симметрична по x_1, x_2, x_3, x_4 , как это и должно быть для скалярных частиц, подчиняющихся статистике Бозе.

По 4-координатам внутренних точек $y_1 = (\tau_1, \rho_1)$, $y_2 = (\tau_2, \rho_2)$ нужно проинтегрировать по всему пространству — времени. При этом различные области интегрирования по временам τ_1, τ_2 отвечают различным промежуточным состояниям. Например, в диаграмме а область $t_1, t_2 < \tau_1 < \tau_2 < t_3, t_4$ отвечает процессу перерассеяния частиц 1 и 2, а область $t_1, t_2 < \tau_2 < \tau_1 < t_3, t_4$ отвечает рождению из вакуума в момент τ_2 четырех частиц, две из которых аннигилируют в момент τ_1 с исходными частицами 1, 2, а две другие приходят в точки 3, 4.

Существование аннигиляционных процессов диктуется лоренц-инвариантностью. Интеграл по области $\tau_1 < \tau_2$ не инвариантен (можно перейти в такую движущуюся систему координат, где $\tau_1' > \tau_2'$), и только в сумме с интегралом по области $\tau_1 > \tau_2$, т. е. при учете аннигиляции, мы получаем лоренц-инвариантную амплитуду.

При этом необходимо к тому же потребовать, чтобы константа λ , соответствующая рассеянию, совпадала с аналогичной константой, соответствующей аннигиляции и рождению частиц из вакуума. Связь между процессами рассеяния и аннигиляцией (кроссинг-симметрия) является характерной чертой локальной релятивистской теории поля и надежно подтверждена экспериментами.

Другой важный принцип, используемый при построении теории поля, — это принцип тождественности частиц.

Хорошо известно из нерелятивистской квантовой механики, что состояния, отличающиеся перестановкой координат (или импульсов) одинаковых частиц, тождественны и не должны учитываться по отдельности в сумме по промежуточным состояниям. Если суммировать по всем таким состояниям, то правильную нормировку можно восстановить, снабдив промежуточное состояние с n частицами множителем $1/n!$, соответствующим числу тождественных перестановок.

Таким образом, диаграмму a надо умножить на $1/2! = 1/2$ для того, чтобы исключить тождественные состояния при $\tau_1 < t < \tau_2$. При этом для лоренц-инвариантности мы должны поставить множитель $1/2$ и в других областях интегрирования по τ_1, τ_2 , например, $\tau_2 < \tau_1$. В этой области множитель $1/2$ учитывает неразличимость частиц, родившихся из вакуума. Аналогично можно проанализировать диаграммы рис. 55, b и c .

Оценки расходимостей и идея перенормировок. Поскольку правила расшифровки графиков найдены, можно приступить к более детальному анализу возникающих выражений. При этом мы сразу же наталкиваемся на расходящиеся интегралы. Действительно, покажем, что диаграммы Фейнмана, содержащие замкнутые петли, расходятся при интегрировании по внутренним координатам или импульсам. Рассмотрим, например, простейшую диаг-

рамму рис. 55, а. Расходимость в ней связана с областью $y_2 \rightarrow y_1$, где каждая функция Грина $G(y_1 - y_2)$, $G(y_2 - y_1)$ ведет себя как (стр. 292)

$$G(y) \rightarrow \text{const}/y^2, \quad y^2 \ll m^{-2}.$$

В результате возникает интеграл, логарифмически расходящийся на нижнем пределе

$$\frac{1}{2} \lambda^2 \int \frac{d^4 y_1 d^4 y_2}{y_{12}^4} G(x_1 - y_1) G(x_2 - y_1) G(x_3 - y_2) G(x_4 - y_2). \quad (6.36)$$

Особенно ясно это видно, если перейти к евклидовой метрике, заменив y_{10}, y_{20} на iy_{14}, iy_{24} ; тогда интересующая нас часть интеграла $\sim \int \frac{y^3 dy}{y^4} \sim \ln(1/mr_0)$.

Расходящаяся часть этого интеграла выделяется в виде множителя

$$\frac{1}{2} \lambda^2 \int \frac{d^4 y_{12}}{y_{12}^4} \int d^4 y_1 G(x_1 - y_1) G(x_2 - y_1) \times \\ \times G(x_3 - y_1) G(x_4 - y_1); (|y_{12}| \ll |x_i - y_1|)$$

и имеет ту же форму, что и вклад диаграммы первого порядка (рис. 53).

Как и диаграмма первого порядка, расходящаяся часть диаграммы второго порядка отвечает точечному взаимодействию, и их имеет смысл объединить, переопределив константу λ точечного взаимодействия. В этом состоит идея перенормировок.

Отбрасывание точечных вкладов соответствует вычитанию из множителя $G(x_1 - y_1)G(x_2 - y_1)G(y_2 - x_3) \times G(y_2 - x_4)$ его значения при $y_2 = y_1$, после чего получается сходящийся интеграл по y_1, y_2 . Не все расходимости сводятся к перенормировке константы взаимодействия. Рассмотрим, например, график второго порядка для функции Грина, изображенный на рис. 56. Он содержит произведение трех функций Грина $G(y)$ и расходит-



Рис. 56.

ся при $y \rightarrow 0$. Возникает расходимость уже не логарифмически, а квадратично зависящая от нижнего предела r_0

$$\int d^4 y G^3(y) \sim \int d^4 y \cdot y^{-6} \sim r_0^{-2}.$$

Мы покажем, что расходящаяся часть этого интеграла может быть включена в перенормировку массы частицы и в перенормировку функции Грина. Для этого удобно записать точное уравнение для функции Грина в форме Дайсона, как мы это делали в задаче многих тел (стр. 247):

$$(\square + m_0^2) \bar{G}(x - x') + i \int \Sigma(x - x_1) \bar{G}(x_1 - x') d^4 x_1 = \\ = -i \delta(x - x'). \quad (6.37)$$

Величина $\Sigma(x, x')$ называется собственно-энергетической частью (для нашего случая бозе-частиц ее иногда называют поляризационным оператором), и в отсутствие внешнего поля, как и функция Грина, зависит только от разности координат $(x - x')$ в силу однородности пространства — времени. Величина $\Sigma(y)$ включает в себя все графики, которые нельзя разбить на части, соединенные одной линией. Во втором порядке теории возмущений по λ эта величина дается внутренней частью графика рис. 56. В Σ отсутствуют диаграммы, соответствующие повторению этого графика, — они уже учтены в $\bar{G}(x_1 - x')$.

Таким образом, в нашей теории интегралы от $\Sigma(y)$ по $d^4 y$ расходятся при $y \rightarrow 0$. Для выделения этой расходимости разложим $\bar{G}(x_1 - x')$ под интегралом в (6.37) в ряд по степеням y , предполагая, что $|x - x'| \gg r_0^2$ (r_0 — определяет границу применимости теории). Мы убедимся, что при этом достаточно использовать только 2 члена разложения — следующие члены представляют собой сходящиеся интегралы, нечувствительные к величине r_0 . Действительно,

$$\int \Sigma(y) \bar{G}(x - x' + y) d^4 y = \\ = \bar{G}(x - x') \int \Sigma(y) d^4 y + \partial_\mu \bar{G}(x - x') \int \Sigma(y) y_\mu d^4 y + \\ + \frac{1}{2} \partial_\mu \partial_\nu \bar{G}(x - x') \int \Sigma(y) y_\mu y_\nu d^4 y + \dots$$

В силу изотропии пространства — времени интеграл,

линейно содержащий y , равен нулю, а интеграл

$$\int \Sigma y_{\mu\nu} y d^4 y = \frac{1}{4} \delta_{\mu\nu} \int \Sigma y^2 d^4 y.$$

Во втором порядке теории возмущений $\Sigma \sim \lambda^2/y^6$. Поэтому интегралы имеют порядок

$$\int \Sigma d^4 y \sim \frac{\lambda^2}{r_0^2}, \quad \int \Sigma y^2 d^4 y \sim \lambda^2 \ln \frac{1}{r_0}.$$

Следующие члены разложения содержат уже сходящиеся интегралы. Обозначим эту часть Σ через Σ' и введем обозначения для двух расходящихся частей

$$i \int \Sigma \tilde{G} d^4 y = i \int \Sigma' \tilde{G} d^4 y + m'^2 \tilde{G} + C \square \tilde{G}.$$

Подставляя в уравнение (6.37), получим

$$(1 - C) \square \tilde{G} + (m_0^2 + m'^2) \tilde{G} + i \int \Sigma' \tilde{G} d^4 y = -i \delta(x - x').$$

Последнее слагаемое записано в символическом виде. Введем обозначения

$$\frac{m_0^2 + m'^2}{1 - C} = m_1^2, \quad \frac{i \Sigma'}{1 - C} = \mu^2, \quad \tilde{G}(1 - C) = G_R.$$

Тогда для G_R получится уравнение, содержащее только наблюдаемые (сходящиеся) величины вместо затравочных

$$(\square + m_1^2 + \mu^2) G_R = -i \delta(x - x').$$

Величины, входящие в это уравнение, конечны. Выразим m_1^2 через наблюдаемую массу m^2 . Для этого перейдем к импульсному представлению. Функция G_R должна иметь полюс при $p^2 = m^2$, что соответствует выражению для энергии частицы $E(p) = (p^2 + m^2)^{1/2}$; следовательно,

$$m^2 = m_1^2 + \mu^2 \quad (p^2 = m^2).$$

Таким образом, выделение расходящихся частей графиков привело к перенормировке массы и к изменению коэффициента при $\delta(x - x')$ в уравнении (6.37). Множитель $Z = 1/(1 - C)$ называется перенормировкой функции Грина и аналогичен множителю, который возникал при выделении квазичастицы из набора состояний, при-

существующих в спектре одночастичной функции Грина (стр. 222, 247).

Учет расходимостей в более сложных графиках Σ приводит только к тому, что во всех внутренних линиях происходит такая же перенормировка массы и константы взаимодействия. Перенормировка внутренних функций Грина убирается в новую константу взаимодействия: от каждой из четырех линий, входящих в точку взаимодействия, забирается по $\sqrt{Z}$, так что $\lambda_1 = Z^2 \lambda$.

Действительно, покажем на примере нескольких простейших диаграмм, что такое переопределение вершин приводит к умножению каждой диаграммы на общий множитель Z^2 , который может быть устранен переопределением двухчастичной функции Грина. Этот результат следует из равенства

$$G_2 = \left\{ \text{---} + \text{---} \times \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \right\} Z^2.$$

Выделение множителя Z из каждой функции Грина соответствует в первом слагаемом в фигурной скобке переходу от нормировки состояний на 1 частицу в единице объема к нормировке на 1 квазичастицу, а множитель Z^2 соответствует переходу к двухквазичастичной функции Грина. Для того чтобы каждый из графиков умножался на тот же множитель, необходимо забрать в λ по $\sqrt{Z}$ от каждой из четырех функций Грина, входящих в точку взаимодействия. Выражение в фигурной скобке уже не содержит величину Z и является функцией Грина двух квазичастиц. Окончательный результат сводится к тому, что можно применять графический метод прямо к наблюдаемым частицам. Таким образом, после выделения расходящихся частей можно пользоваться методом квазичастиц так же, как и в задаче многих тел.

Итак, идея перенормировок состоит в том, что расходящиеся выражения могут быть удалены из расчетов путем переопределения констант, входящих во взаимодействие и в функцию Грина. Мы увидим, что такую процедуру можно провести не во всех теориях поля, т. е. что не все теории перенормируемы.

Условие перенормируемости. Нетрудно убедиться, что теория с 4-фермионным взаимодействием представляет собой пример неперенормируемой теории.

Диаграммы для взаимодействия частиц со спином $1/2$ имеют тот же вид (рис. 53, 55), что и для скалярных частиц, но функция Грина $G(x)$ имеет более сильную расходимость при $x \rightarrow 0$ (стр. 294):

$$G(x) = \text{const} \frac{\gamma_\mu x_\mu}{x^4} \sim \frac{1}{x^3}.$$

Диаграмма (рис. 55, а) расходится квадратично

$$\lambda_F^2 \int G(z) G(z) d^4 z \sim \lambda_F^2 \int \frac{d^4 z}{z^6}.$$

Поэтому для устранения расходимости нужно выделить из функций Грина

$$G(x_1 - y)G(x_2 - y)G(y + z - x_3)G(y + z - x_4)$$

выражения (6.36) первые два члена разложения по z . Эти члены имитируют 4-точечное взаимодействие вида

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{эфф}}(y) = & \lambda_F^2 \int G(z) G(z) d^4 z + \lambda_F^2 \int G(z) G(z) z_\mu d^4 z \frac{\partial}{\partial y_\mu} + \\ & + \frac{\lambda_F^2}{2} \int G(z) G(z) z_\mu z_\nu d^4 z \frac{\partial}{\partial y_\mu} \frac{\partial}{\partial y_\nu}. \end{aligned}$$

Таким образом, расходимости приводят к изменению структуры исходного взаимодействия — приходится рассматривать взаимодействие, зависящее от градиентов. При переходе к более сложным графикам, например, рисунка 57, появляются члены с более высокими

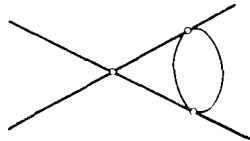


Рис. 57.

производными $\frac{\partial^3}{\partial y^3}$, $\frac{\partial^4}{\partial y^4}$ и т. д.

Добавки можно воспринимать как перенормировки параметров в исходном взаимодействии вида

$$\hat{V}_y = \lambda_F + C_1 \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial y_\mu} + C_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \dots$$

Этот ряд не обрывается и содержит бесконечное количество градиентов. В результате исходное взаимодействие приходится предполагать нелокальным и оно может иметь,

например, структуру

$$\hat{V}_y = \left(\frac{g}{m}\right)^2 \sum_n \left(\frac{-\partial^2}{\partial y^2}\right)^n m^{-2n} = \frac{g^2}{m^2 + \square},$$

соответствующую обмену частицей с массой m .

Иными словами, локальное 4-фермионное взаимодействие не имеет смысла. Непротиворечивое (т. е. перенормируемое) взаимодействие фермионов можно построить, если исходить из локального взаимодействия фермионов с бозонами (рис. 54). Эта идея используется в теории сильного взаимодействия элементарных частиц и в современных моделях теории слабого взаимодействия.

В чем же общая закономерность — как сразу сказать, перенормируема ли теория?

Критерий можно найти на основе анализа размерностей.

Константа λ взаимодействия четырех скалярных частиц безразмерна. Действительно, как мы видели, добавки к амплитуде имеют вид:



$$\lambda + \lambda^2 \int \frac{d^4 y}{y^4},$$

т. е. λ безразмерна.

Константа, соответствующая взаимодействию фермионов с бозонами (рис. 58), тоже безразмерна, что можно увидеть из сравнения двух простейших графиков. Если первому графику соответствует константа g , то второй имеет порядок

$$g^3 \int G_F G_F G_B d^4 x_1 d^4 x_2 \sim g^3 \frac{x^4 x^4}{x^6 x^2},$$

т. е. константа g безразмерна. Такая же оценка с заменой g на e приводит к заключению о безразмерности константы электромагнитного взаимодействия e . Константа λ_F 4-фермионного взаимодействия имеет размерность квадрата длины. Это легко видеть из сравнения двух графиков амплитуды перехода:

$$\frac{x_1}{x_2} \frac{x_3}{x_4} + \frac{x_1}{x_2} \frac{x_3}{x_4} \lambda_F = G_F G_F + \lambda_F \int G_F^4 d^4 y.$$

Отсюда размерность $\lambda_F \sim l^2$. Поэтому добавки имеют вид:

$$\lambda_F + \lambda_F^2 \int \frac{d^4 y}{y^6},$$

т. е. расходятся квадратично и требуют, как мы видели, добавления градиентов во взаимодействие.

Константа g трехбозонного взаимодействия, упомянутого выше, как легко видеть из рис. 58 с заменой фермионов на бозоны, имеет размерность $g \sim l^{-1}$, и, следовательно, добавки к этой константе от области расстояний $\sim r_0$ будут иметь вид

$$\text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} = g + g^3 \frac{y^8}{y^6} = g(1 + O(g^2 r_0^2)),$$

т. е. взаимодействие в такой теории не содержит расходимостей. Единственная перенормировка, которую нужно сделать, — это перенормировка массы во втором порядке теории возмущений, соответствующая графику

$$\Sigma^{(2)} = \text{---} \text{---} \text{---},$$

что дает $m'^2 \sim g^2 \ln \frac{1}{mr_0}$. Вообще для любого точечного взаимодействия с константой γ поправки n -го порядка к безразмерной величине будут иметь вид

$$(\gamma r_0^{-d})^n,$$

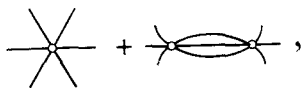
где $[r_0^d]$ — размерность γ . В случае 4-фермионного взаимодействия поправка n -го порядка будет содержать r_0^{-2n} , что и приводит к появлению высоких производных во взаимодействии. В тех же случаях, когда константа γ безразмерна, расходимости в n -м порядке имеют вид (см. ниже)

$$\gamma^n \left(C_0 \ln^n \frac{1}{mr_0} + C_1 \ln^{n-1} \frac{1}{mr_0} + \dots \right).$$

Из соображений размерности можно сразу же убедиться, что в теории 4-бозонного взаимодействия не возникают локальные взаимодействия с большим числом участвующих частиц, например вида



Размерность константы такого взаимодействия находится из сравнения двух графиков



откуда $[\lambda_6] = l^2$ и, следовательно, $\lambda_6 \sim r_0^2 \rightarrow 0$. Этот же результат можно получить, рассмотрев простейший график

$$\lambda_6 = \text{triangle diagram}.$$

Предоставляем читателю убедиться, что в случае 4-фермионного взаимодействия возникает локальное взаимодействие любого четного числа частиц.

Мы пришли к важному выводу, что не все полевые теории могут быть построены в предположении локальности. Для того чтобы локальная теория была перенормируема, необходимо, чтобы константа взаимодействия была безразмерна. Этот критерий — необходимый, но не достаточный. Так, например, в теориях, содержащих векторные частицы с массой, отличной от нуля, как видно из выражения (6.33) для функции Грина такой частицы, масса не выпадает из теории при больших 4-импульсах $k^2 \gg m^2$, и приведенные выше размерные соображения неприменимы. Возникают интегралы, расходящиеся степенным образом.

Логарифмическое приближение и перенормируемость. Как мы видели, в теориях с безразмерной константой взаимодействия возникают логарифмически расходящиеся интегралы, которые могут быть включены в перенормировки константы взаимодействия, массы и функций Грина. В каждом порядке теории возмущений увеличивает-ся степень логарифма.

Для того чтобы провести программу перенормировок в высших порядках теории возмущений, используем логарифмическое приближение, которое применяется во многих задачах квантовой теории поля. Логарифмически расходящиеся интегралы, возникающие в перенормируемых теориях, обрезаются на расстояниях r_0 много меньших, чем интересующие нас расстояния (расстояния меж-

ду концами амплитуды перехода). В результате возникают большие логарифмы $l \sim \ln \frac{y^2}{r_0^2}$, что позволяет при $\lambda \ll 1$ сохранять в каждом порядке теории возмущений только члены с наивысшей степенью логарифма. Мы сначала проведем эту процедуру на первых порядках теории возмущений, а затем обобщим полученные результаты на все порядки, пользуясь сформулированным ниже свойством перенормируемости.

Обрезание интегралов будет иметь смысл, если ответ не будет зависеть от способа обрезания, т. е. если оставшиеся интегралы будут определяться областью $y^2 \gg r_0^2$. Как мы сейчас увидим, возникающие в теории логарифмические интегралы действительно обладают этим свойством.

Нам будет удобно работать не в координатном, а в импульсном представлении, в котором функции Грина $G(k)$ имеют простой вид

$$G(k) = \frac{1}{k^2 - m^2}.$$

В импульсном представлении вклад графика рис. 53 равен просто

$$-i\lambda \frac{1}{k_1^2 - m^2} \frac{1}{k_2^2 - m^2} \frac{1}{k_3^2 - m^2} \frac{1}{k_4^2 - m^2} \delta\left(\sum_{i=1}^4 k_i\right) (2\pi)^4.$$

Множитель $-i\delta(\Sigma k)(2\pi)^4$, выражающий закон сохранения энергии импульса, и множители $1/(k_i^2 - m^2)$, соответствующие наружным функциям Грина, будут встречаться во всех диаграммах, и мы будем их опускать. Оставшееся после этого выражение называется амплитудой рассеяния частиц.

Графики второго порядка соответствуют добавке к λ вида

$$\begin{aligned} & \text{Диаграмма: } \text{Внешние линии } 1, 2, 3, 4 \text{ соединены двумя внутренними линиями.} \\ &= -\frac{1}{2} \lambda^2 \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4 i} \frac{1}{[(p_1 + p_2 - k)^2 - m^2 + i\varepsilon][k^2 - m^2 + i\varepsilon]}. \end{aligned} \quad (6.38)$$

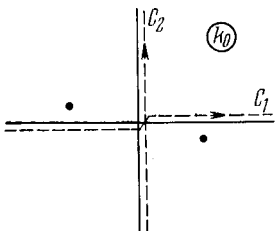
Будем для простоты считать наружные импульсы $p_1, p_2,$

p_3, p_4 чисто пространственными: $p_{0i} = 0$. (От этого предположения можно освободиться после получения окончательного результата.) Тогда интегралы теории возмущений будут чисто вещественными.

Действительно, интеграл по энергетической компоненте k_0 в (6.38) имеет вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_0}{2\pi i} \frac{1}{[k_0^2 - (p_1 + p_2 - k)^2 - m^2 + i\varepsilon][k_0^2 - k^2 - m^2 + i\varepsilon]} \quad (6.39)$$

Особенности подинтегрального выражения изображены на рис. 59. Не пересекая особенностей, можно деформировать контур интегрирования C_1 в мнимую ось C_2 , т. е. перейти к интегралу по $k_4 = -ik_0$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_0}{2\pi i} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_4}{2\pi}$$

Рис. 59.

Этот прием называется поворотом Вика. После поворота Вика пространство импульсов становится евклидовым: $k^2 = k_0^2 - \mathbf{k}^2 = -k_4^2 - \mathbf{k}^2 \equiv -\mathbf{k}_v^2 \equiv -\tilde{k}^2$. Итак, интеграл в (6.38) сводится к интегралу по евклидову пространству

$$\text{Фейнмановская диаграмма (два вершины, соединенные двумя линиями)} = -\frac{1}{2} \lambda^2 \int \frac{d^4 \tilde{k}}{(2\pi)^4} \frac{1}{[\tilde{k}^2 + m^2][(p_1 + p_2 - \tilde{k})^2 + m^2]}$$

Такие интегралы положительны и их нетрудно оценивать, поскольку угловое интегрирование производится по конечной площади единичной сферы в 4-мерном пространстве $S = 2\pi^2$, так что расходимости связаны только с бесконечной областью интегрирования по $|\tilde{k}| = \sqrt{\tilde{k}^2}$.

Ограничим интегрирование по $|\tilde{k}|$ некоторой большой величиной $L \gg m, |\tilde{p}_1 + \tilde{p}_2|$. Эта величина соответствует обрезанию на расстояниях порядка r_0 в координатном представлении ($L \sim 1/r_0$). Вычислим интеграл, считая, что $|p_1 + p_2|^2 \equiv p_{12}^2 \gg m^2$ (эта область понадобится в дальнейшем). Отбрасывая в подинтегральном

выражении m^2 и p_{12}^2 , получим

$$\int_{p_{12}}^L \frac{d^4 \tilde{k}}{(2\pi)^4 \tilde{k}^4} = \frac{1}{16\pi^2} \int_{p_{12}^2}^{L^2} \frac{d\tilde{k}^2}{\tilde{k}^2} = \frac{1}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{p_{12}^2}.$$

Относительная ошибка такого вычисления $\sim 1/\ln \frac{L^2}{p_{12}^2} \ll 1$.

Аналогично вычисляются диаграммы рис. 51, б, в, отличающиеся заменой $p_1 + p_2 \rightarrow p_1 + p_3$ и $p_1 + p_2 \rightarrow p_1 + p_4$.

Сумма всех поправок второго порядка вместе с затраченной константой имеет вид

$$\begin{aligned} \lambda + A^{(2)}(p_1, p_2, p_3, p_4) = \\ = \lambda - \frac{1}{2} \frac{\lambda^2}{16\pi^2} \left(\ln \frac{L^2}{p_{12}^2} + \ln \frac{L^2}{p_{13}^2} + \ln \frac{L^2}{p_{14}^2} \right). \end{aligned}$$

Будем считать, что все импульсы p_1, p_2, p_3, p_4 одного порядка ($\sim p$) и много меньше L . Тогда все три члена в скобках можно считать равными, и мы получаем

$$\lambda + A^{(2)}(p) \simeq \lambda - \frac{3}{2} \frac{\lambda^2}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{p^2} \equiv \lambda \left(1 - \frac{3}{2} \xi \right).$$

Здесь и дальше обозначим $\xi = \frac{\lambda}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{p^2}$.

Найденная поправка становится порядка первого члена, когда $\frac{\lambda}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{p^2} \sim 1$. При этом могут стать существенными следующие поправки $\sim \lambda^3$, если они умножаются

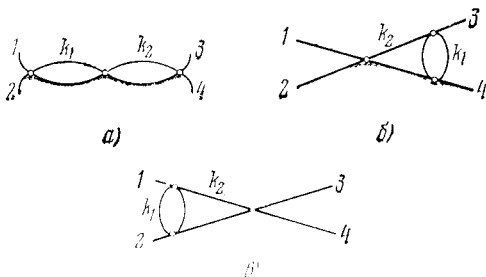


Рис. 60.

на $(\ln(L^2/p^2))^2$. Поправками порядка $\lambda^3 \ln(L^2/p^2)$ и порядка λ^3 можно пренебречь. Рассмотрим теперь графики третьего порядка (рис. 60).

Мы не рассматриваем графики вида



соответствующие перенормировке массы входных частиц и перенормировке функции Грина. Первая перенормировка означает переопределение массы входных частиц. Что же касается множителя $\sqrt{Z}$, который должен входить от каждой линии в новую константу λ , то он, как легко видеть, имеет вид $1 + C_1 \lambda^2 \ln(L^2/p^2)$, т. е. не должен учитываться при отборе старших логарифмов.

Кроме нарисованных графиков, есть диаграммы, отличающиеся перестановками наружных импульсов $p_1 \leftrightarrow p_3$, $p_1 \leftrightarrow p_4$. С логарифмической точностью при $p_1 \sim \sim p_2 \sim \dots \sim p$ перестановки импульсов не меняют вклада графика. Поэтому для учета перестановок достаточно умножить диаграммы рис. 60 на 3. Кроме того, учет тождественности внутренних частиц приводит к множителю $\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}$ в графике *a* и к множителю $\frac{1}{2}$ для диаграмм *б*, *в*.

График *a* вычисляется проще всего, поскольку интегрирования по k_1 и k_2 независимы:

$$\text{Diagram } a = \left(\text{Diagram } b \right)^2 = \lambda \frac{1}{i} \xi^2.$$

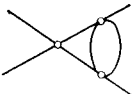
В двукратном интеграле, соответствующем графику *б*, мы знаем вклад интеграла по k_1

$$\begin{aligned} & \text{Diagram } b = \\ &= \frac{1}{2} \lambda \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4} \frac{1}{k_1^2 (k_1 - p - k_2)^2} = \frac{1}{2} \lambda \frac{1}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{(p + k_2)^2}. \end{aligned}$$

При интегрировании по k_2 существенны $k_2 \gg p$

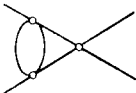
$$\begin{aligned} & \text{Diagram } c = \lambda^2 \int_p^L \frac{d^4 k_2}{(2\pi)^4} \frac{1}{k_2^4} \cdot \frac{1}{2} \lambda \frac{1}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{k_2^2}. \end{aligned}$$

Проинтегрируем по углам $\int d^4 k_2 = \pi^2 \int k_2^2 dk_2^2$ и введем логарифмическую переменную $\eta = \frac{\lambda}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{k^2}$, тогда получаем простой интеграл



$$= \lambda \frac{1}{2} \int_0^{\xi} d\eta \cdot \eta = \lambda \frac{\xi^2}{4}.$$

График *в* отличается перестановкой наружных импульсов и потому вносит такой же вклад



$$= \lambda \frac{\xi^2}{4}.$$

Итак, мы нашли вклад суммы графиков третьего порядка

$$A^{(3)}(p) = \lambda \cdot 3 \left(\frac{\xi^2}{4} + \frac{\xi^2}{4} + \frac{\xi^2}{4} \right) = \lambda \cdot \frac{9}{4} \xi^2.$$

В каждом следующем порядке теории возмущений будет добавляться λ и одно интегрирование, т. е. еще одна степень ξ . Поэтому полная амплитуда имеет вид

$$A \equiv \lambda f(\xi) = \lambda \left(1 - \frac{3}{2} \xi + \frac{9}{4} \xi^2 + \dots \right). \quad (6.40)$$

Вычисление графиков 4-го порядка, которое мы опускаем, дает слагаемое в $f(\xi)$, равное $-(\frac{3}{2}\xi)^3$. Таким образом, первые члены функции $f(\xi)$ являются степенями величины $\frac{3}{2}\xi$. Предположим, что и дальнейшие слагаемые подчиняются этому правилу, т. е. что $f(\xi)$ есть сумма членов ряда геометрической прогрессии, тогда

$$A = \frac{\lambda}{1 + \frac{3}{2} \xi} = \frac{\lambda}{1 + \frac{3}{2} \frac{\lambda}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{p^2}}. \quad (6.41)$$

Из физических соображений мы ожидаем, что радиус обрезания L должен как-то выпасть из ответа. Анализ диаграмм в координатном пространстве навел нас еще раньше на идею перенормировки, т. е. переопределения затравоч-

ной константы за счет включения в нее расходящихся вкладов от высших диаграмм.

Формула (6.41) подходит для такого переопределения, что сразу видно, если ее переписать так:

$$A(p) = \frac{1}{\lambda^{-1} + \frac{3}{2} \frac{1}{16\pi^2} \ln L^2 - \frac{3}{2} \frac{1}{16\pi^2} \ln p^2}.$$

При изменении L мы можем так изменить λ , чтобы амплитуда $A(p)$ не изменилась.

Если мы зададим значение амплитуды $A(p^2)$ в некоторой точке $p^2 = \mu^2$

$$A(\mu) = \frac{1}{\lambda^{-1} + \frac{3}{2} \frac{1}{16\pi^2} \ln \frac{L^2}{\mu^2}} \equiv \lambda_R$$

и назовем величину $A(\mu)$ перенормированной константой λ_R , то связь между амплитудой $A(p)$ и λ_R уже не будет содержать радиуса обрезания:

$$A(p) = \frac{\lambda_R}{1 - \frac{3}{2} \frac{\lambda_R}{16\pi^2} \ln \frac{p^2}{\mu^2}}. \quad (6.42)$$

Для определенности можно в качестве μ взять перенормированную массу частицы m .

Таким образом, геометрическая прогрессия, обнаруженная на первых членах выражения для $A(\xi)$, не является случайной особенностью первых членов, а отражает важное свойство рассматриваемой теории — свойство перенормируемости.

Получим выражение (6.42), не пользуясь рядами теории возмущений по λ , а непосредственно из требования перенормируемости — амплитуда A не должна зависеть от импульса обрезания L . Итак, полная производная от амплитуды, выраженной через λ и $\ln(L^2/p^2)$, по $\ln L^2$ при постоянной λ_R должна быть равна нулю. Используя (6.40) и дифференцируя A по $\frac{1}{16\pi^2} \ln L^2 = u$, получаем

$$\frac{dA}{du} = 0 = \lambda^2 \frac{df}{d\xi} + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial u} \right)_{\lambda_R} \left(f(\xi) + \frac{df}{d\xi} \xi \right).$$

В этом уравнении можно изменять ξ при фиксированном

L , т. е. сохраняя λ и $\left(\frac{\partial \lambda}{\partial u}\right)_{\lambda_R}$. Полагая $\xi = 0$ ($p = L$), находим

$$\left(\frac{\partial \lambda}{\partial u}\right)_{\lambda_R} f(0) = -\lambda^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \xi}\right)_0.$$

Используя значения $f(0)$ и $f'(0)$, из (6.40) получаем

$$\left(\xi + \frac{2}{3}\right) f'(\xi) + f(\xi) = 0.$$

Решение этого уравнения

$$f(\xi) = \frac{1}{1 + \frac{3}{2}\xi},$$

что приводит к предположенному выше выражению (6.41), а следовательно, и к (6.42). Из (6.42) следует, что величина A растет с увеличением p^2 (что эквивалентно уменьшению расстояний x). При приближении к полюсу этого выражения формула перестает быть справедливой. Критерием применимости выражения (6.42) является малость величины A . Для пояснения перейдем в координатное представление. В графиках амплитуды $A(x)$ при $mx \ll 1$ существенны расстояния между актами взаимодействия виртуальных частиц тоже порядка x . Действительно, все элементы графиков, соответствующие малым расстояниям (расходящиеся при малых x), убираются в перенормировки взаимодействия, массы и функции Грина. Расстояния, большие чем x , вносят малый вклад из-за убывания функций Грина. В этом нетрудно убедиться на примере рассмотренных выше графиков. Рассеяние виртуальных частиц будет определяться величиной $A_1 \sim A(x)$, которая будет заменять величину λ_R на малых расстояниях. Поэтому критерий применимости использованного нами исходного выражения (6.41) будет не $\lambda \ll 1$, а $A \ll 1$.

Эти соображения наводят на мысль о возможности более общей формулировки перенормируемости, не предполагающей малости константы λ_R . Ниже мы вернемся к этому вопросу при изучении свойств квантовой электродинамики на сверхмалых расстояниях. Заметим, что мы могли бы получить те же результаты и не вводя затравочной константы λ и соответствующего радиуса обрезания L (или r_0 в координатном представлении). Вместо

этого можно ввести условный радиус обрезания r_c много больший, чем граница применимости теории r_0 , но в то же время много меньший, чем интересующие нас расстояния x . Вклад областей интегрирования, меньших чем r_c , будем включать в условную константу взаимодействия λ_c (которая будет локальной с точностью до r_c). При $\lambda_c \ll 1$ амплитуда $A = A\left(\lambda_c \ln \frac{x^2}{r_c^2}\right)$ или в импульсном представлении $A = A\left(\lambda_c \ln \frac{L_c^2}{p^2}\right)$. Так как точка $r_c = L_c^{-1}$ произвольна, то амплитуда не должна зависеть от выбора этой точки. Повторяя приведенный выше вывод с заменой L на L_c и λ на λ_c , мы приходим к тем же результатам.

3. КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА НА МАЛЫХ РАССТОЯНИЯХ

Рассмотренная выше теория скалярного поля не описывает реальной физической системы. Реально существующие скалярные частицы (мезоны) взаимодействуют не только между собой, но и со спинорными частицами (барионами) и к тому же константа взаимодействия велика, так что теория возмущений здесь неприменима.

Теория скалярного поля с малой константой взаимодействия представляет собой лишь простейшую модель, которая послужила нам для выяснения общих свойств теории поля на малых расстояниях.

Теперь мы перейдем к реалистической теории — квантовой электродинамике, т. е. к теории, описывающей взаимодействие электронов, позитронов и фотонов.

Локальное взаимодействие в квантовой электродинамике. В разделе 1 были найдены функции Грина электрона (позитрона) и фотона. Осталось ввести взаимодействие между этими частицами.

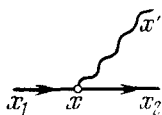


Рис. 61.

Простейший электромагнитный процесс изображен на рис. 61. Линия со стрелкой соответствует распространению электрона (позитрона), а волнистая линия — распространению фотона.

В точке x происходит локальное взаимодействие. Общее выражение для амплитуды процесса на рис. 61

имеет вид

$$-i \bar{\Psi}_1 \int d^4x G(x_1 - x) \hat{\Gamma}_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) G(x - x_2) D_{\mu\nu}(x - x') \Psi_2 e_\nu, \quad (6.43)$$

где Ψ_1, Ψ_2, e_ν — волновые функции электрона (или позитрона) и фотона; $\hat{\Gamma}_\mu (\partial/\partial x)$ — неизвестная функция. Производные $\partial/\partial x$ могут действовать на любую из трех функций Грина. Явная зависимость Γ_μ от x исключается из требования однородности пространства. Для лоренц-инвариантности амплитуды перехода требуется, чтобы величина $\bar{\Psi}_1 \Gamma_\mu \Psi_2$ преобразовывалась как 4-вектор, который должен быть построен из γ_μ и $\partial/\partial x_\mu$. Однако зависимость Γ_μ от градиентов означала бы введение размерной константы взаимодействия, что нарушило бы перенормируемость. Для устранения расходимостей пришлось бы ввести бесконечное число членов вида $(\partial/\partial x)^n$, т. е. потерять локальность. Для пояснения оценим вклад графиков 3-го порядка для вершины вида

$$\Gamma_{1\mu} = i\mu_1 (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu) \partial/\partial x_\nu.$$

В импульсном представлении имеем

$$\Gamma_{1\mu} = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]}$$

Область интегрирования $q \gg p, k$ дает

$$\Gamma_{1\mu} \sim \Gamma_{1\mu}^{(0)} \left(1 + \mu_1^2 \int q^2 \frac{1}{q^2} \frac{1}{q} \frac{1}{q} d^4q \right) = \Gamma_{1\mu}^{(0)} (1 + \mu_1^2 L^2).$$

Получилась квадратично расходящаяся добавка в соответствии с размерностью μ_1 ($[\mu_1] = 1/m$).

Таким образом, мы приходим к так называемому минимальному электромагнитному взаимодействию

$$\Gamma_\mu = e\gamma_\mu \quad (6.44)$$

с безразмерной константой взаимодействия, совпадающей, как мы увидим, с зарядом электрона в единицах Хевисайда ($e^2/4\pi = 1/137$). Любые добавки к этой вершине возни-

кают только как вторичный эффект при вычислении графиков более высокого порядка по e . Так, например, рассмотренный выше график третьего порядка с вершинами (6.44) приводит к добавке к Γ_μ рассмотренного выше вида, где μ_1 — поправка к магнитному моменту электрона. Эта поправка вычислена с помощью (6.44) до 6-го порядка по e и с огромной точностью совпадает с опытом.

Для того, чтобы убедиться, что константа e совпадает с зарядом электрона, достаточно взять матричный элемент выражения (6.44), соответствующий переходу нерелятивистского электрона с испусканием кванта, и сравнить его с выражением, полученным на стр. 51.

Волновая функция, соответствующая одному фотону в единице объема, равна $e_\mu^{(\lambda)}/\sqrt{2k_0}$. Эту нормировку легко проверить, вычисляя энергию электромагнитного поля $\int \frac{1}{2}(\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2) dV = \omega$. В результате получаем для поперечной калибровки ($e_0^{(\lambda)} = 0$)

$$-ie\bar{u}_\alpha^{(\sigma)} (\gamma_i)_{\alpha\beta} u_\beta^{(\sigma')} e_i^{(\lambda)} \frac{1}{\sqrt{2k_0}}. \quad (6.45)$$

Пренебрегая изменением импульса электрона, получаем

$$\bar{u}(p_1) \gamma_\mu u(p_1) = \frac{p_\mu}{m}.$$

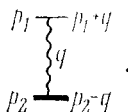
Правильность этого выражения сразу же проверяется умножением на p_μ и использованием уравнения Дирака. Добавка к гамильтониану электрона соответствует выражению (6.45) без множителя $(-i)$, т. е.

$$H' = e(v e^{(\lambda)}) \frac{1}{\sqrt{2k_0}}, \quad v_i = \frac{p_i}{m},$$

что в точности соответствует выражению (1.23) на стр. 51 (здесь заряд e — в единицах Хевисайда). Так как $u^{(\sigma)}(p, \alpha)$ для отрицательных энергий соответствует позитрону с импульсом $-p$ (см. стр. 290), то в случае позитрона это выражение изменяет знак, т. е. заряд позитрона противоположен заряду электрона. Так как выражение $e_i^{(\lambda)}/\sqrt{2k_0}$ представляет векторный потенциал, соответствующий одному фотону, то матричный элемент в произ-

вольном электромагнитном поле A_μ получится заменой $e_\mu^{(\lambda)} / \sqrt{2k_0}$ на A_μ . Этим определяется правило введения внешнего электромагнитного поля в уравнение Дирака — следует к величине $\gamma_\mu p_\mu$ добавить $e\gamma_\mu A_\mu$. Действительно, при этом уравнение для функции Грина дает $G^{(1)} = G(-ie\gamma_\mu A_\mu)G$ в соответствии с выражением (5.33). Вычисление следующих порядков по e в Γ_μ дает наряду с поправкой к магнитному моменту поправку по взаимодействию электрона с полем ядра, приводящую к рассмотренному на стр. 68 лэмбовскому сдвигу атомных уровней.

Рассмотрим амплитуду перехода, соответствующую рассеянию двух частиц, например, электрона и протона. В наинизшем порядке по e этот процесс определяется графиком



$$(6.46)$$

Короткие концы у электронных и протонных линий означают, что функции распространения, соответствующие входным и выходным линиям, не включены в рассматриваемую амплитуду перехода. Матричный элемент перехода, соответствующий этому графику, можно записать в виде

$$-e^2(-i)^2 \bar{\Psi}_1^e \gamma_\mu \Psi_2^e D_{\mu\nu}(q) \bar{\Psi}_1^p \gamma_\nu \Psi_2^p.$$

Для малых 4-импульсов q ($q \ll M_p$) можно считать движение протона заданным и тогда множитель справа от $D_{\mu\nu}$ представляет собой q -ю компоненту 4-тока протона, движущегося с импульсом p_2 , а выражение $D_{\mu\nu}(q) j_\nu^p(q)$ есть q -я компонента векторного потенциала

$$A_\mu(x) = i \int D_{\mu\nu}(x-x') j_\nu^p(x') d^4x', \quad (6.47)$$

протонного тока (стр. 297). В этом случае задача рассеяния электрона сводится к задаче рассеяния во внешнем поле $A_\mu(x)$. Для учета отдачи протона достаточно понимать под $j^p(x)$ ток перехода, т. е. матричный элемент оператора тока между начальным и конечным состояниями протона. Учет графиков, поправляющих $D_{\mu\nu}$, приведет к

тому, что в (6.47) $D_{\mu\nu}$ заменится на точную функцию $\tilde{D}_{\mu\nu}$, к рассмотрению которой мы сейчас перейдем.

Поляризация вакуума. В присутствии внешнего поля в вакууме возникают поляризационные токи и заряды, связанные с появлением виртуальных пар. Дополнительные заряды, наведенные в вакууме, как мы увидим, экранируют внесенные в вакуум заряды. Такого же типа явления происходят в диэлектрике. Поэтому для выяснения физической картины вакуумных процессов полезно проследить аналогию с классической электродинамикой поляризующейся среды.

Напишем уравнение Дайсона (стр. 245, 304) для точной функции Грина фотона $\tilde{D}_{\mu\nu}$, которая содержит все возможные виртуальные процессы, происходящие при распространении фотона в вакууме. Как мы увидим, это уравнение имеет простое соответствие в классической электродинамике. Введем блок $\Pi_{\mu\nu}(x - x')$, не содержащий частей, соединенных одной фотонной линией. Повторяя вычисления на стр. 245, находим в операторном виде

$$\tilde{D} = D + D\Pi\tilde{D}.$$

Умножая слева на $-iD^{-1}$, получаем в координатном представлении

$$\begin{aligned} \square \tilde{D}_{\mu\nu}(x - x') + i \int \Pi_{\mu\gamma}(x - x_1) \tilde{D}_{\gamma\nu}(x_1 - x') d^4x_1 = \\ = -ig_{\mu\nu}\delta(x - x'). \end{aligned} \quad (6.48)$$

Запишем это уравнение в операторном виде и умножим его справа на величину j^{ex} , где j^{ex} — ток, создаваемый зарядами, внесенными в вакуум. Имеем

$$\square \tilde{D}j^{\text{ex}} + i\Pi\tilde{D}j^{\text{ex}} = -ij^{\text{ex}}.$$

Поскольку $\tilde{D}j^{\text{ex}} = -iA$, это уравнение совпадает с уравнением для векторного потенциала в поляризующейся среде $\square A = j + j^{\text{ex}}$; $j = i\Pi A$ — поляризационный ток, т. е. $\square A + i\Pi A = j^{\text{ex}}$. Таким образом, величина Π определяет поляризационный ток, вызываемый векторным потенциалом, а $\tilde{D}$ представляет собой функцию Грина однородного уравнения для потенциала A в поляризующейся среде. Восстанавливая индексы и интегрирование, получим

$$A_\mu(x) = i \int \tilde{D}_{\mu\nu}(x - x') j_\nu^{\text{ex}}(x') d^4x'. \quad (6.49)$$

Эта формула обобщает аналогичное выражение (6.47) на случай поляризуемой среды. Поляризационный ток дается выражением

$$j_{\mu}(x) = i \int \Pi_{\mu\nu}(x - x') A_{\nu}(x') d^4 x'. \quad (6.50)$$

Для пояснения этих формул рассмотрим случай неподвижного заряда, покоящегося в начале координат $j_i^{\text{ex}} = 0$, $j_0^{\text{ex}} = e_0 \delta(\mathbf{r})$ и $A_i = 0$, $e_0 A_0 = V(\mathbf{r})$.

Для поля $V(\mathbf{r})$ из (6.49) получаем

$$V(\mathbf{r}) = i e_0^2 \int \tilde{D}_{00}(t, \mathbf{r}) dt = - e_0^2 \tilde{D}_{00}(\omega = 0, \mathbf{r}), \quad (6.51)$$

где $\tilde{D}(\omega, \mathbf{r})$ — точная функция Грина фотона в смешанном представлении.

Плотность наведенных зарядов равна

$$\rho(\mathbf{r}) = -i e_0 \int \Pi_{00}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \tau) \tilde{D}_{00}(\omega = 0, \mathbf{r}') d\tau d\mathbf{r}'. \quad (6.52)$$

Подставляя в (6.51) невозмущенную функцию Грина $D_{00}(\omega = 0, \mathbf{r}) = -1/4\pi r$ (стр. 297), получаем закон Кулона. Так как ток $j_{\mu}(x)$ должен удовлетворять уравнению неразрывности

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

то из (6.50) следует, что

$$\frac{\partial \Pi_{\mu\nu}(x - x')}{\partial x_{\mu}} = 0. \quad (6.53)$$

Кроме того, как видно из графического определения, $\Pi_{\mu\nu} = \Pi_{\nu\mu}$, поэтому условие (6.53) обеспечивает и калибровочную инвариантность, т. е. неизменность тока при добавлении к A_{ν} величины $\partial_{\nu} f$. Однако, как мы увидим, в квантовой электродинамике величина $\Pi_{\mu\nu}(x)$ имеет сильную особенность при $x \rightarrow 0$, и условие (6.53) в точке $x = 0$ нарушается. Это означает, что при малых x квантовая электродинамика должна быть модифицирована так, чтобы обеспечить калибровочную инвариантность и сохранение тока.

В следующем разделе мы используем выражение (6.51) для нахождения поправки к закону Кулона, вызываемой

появлением в вакууме наведенных зарядов, плотность которых определяется соотношением (6.52).

Радиационные поправки к закону Кулона. Квантовая электродинамика предсказывает отклонения от закона Кулона. Эти отклонения связаны с диаграммами высшего порядка (так называемые радиационные поправки). Как мы сейчас увидим, физическая природа поправок к закону Кулона определяется поляризацией вакуума.

Несмотря на то, что радиационные поправки содержат малый параметр $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, они имеют принципиальное значение, поскольку они позволяют выяснить характер расходимостей на малых расстояниях.

Именно при изучении радиационных поправок в квантовой электродинамике родилась идея перенормировок, лежащая в основе современной теории взаимодействий элементарных частиц. Итак, найдем первую радиационную поправку к закону Кулона.

Рассмотрим бесконечно тяжелую заряженную частицу, покоящуюся в начале координат. Поле, создаваемое такой частицей, определяется выражением (6.51). В нулевом приближении это выражение дает закон Кулона. Изменение закона Кулона определяется появлением экранирующих поляризационных зарядов и, следовательно, определяется поправкой к $D_{\mu\nu}$. В наинизшем порядке по затравочному заряду e_0 имеем

$$D_{\mu\nu}^{(2)} = \text{---} r \text{---} r_1 \text{---} \text{---} \text{---} r_2 \text{---} \theta \text{---} . \quad (6.54)$$

Будем проводить вычисления в смешанном представлении. Тогда, используя $i\Pi(0, r) \equiv \int \Pi(\tau, r) d\tau$, получим

$$D_{\mu\nu}^{(2)}(0, r) = - \int D_{\mu\gamma}(0, r - r_1) \Pi_{\gamma\rho}(0, r_1 - r_2) D_{\rho\nu}(0, r_2) dr_1 dr_2. \quad (6.54')$$

Здесь $D_{\mu\nu}(0, r)$ — свободная функция Грина в смешанном представлении (стр. 297)

$$D_{\mu\nu}(0, r) = - \frac{1}{4\pi r} g_{\mu\nu}$$

(мы выбрали поперечную калибровку $d = 1$, см. стр. 296).

$\Pi_{\mu\nu}$ — поляризационный оператор, введенный в предыдущем разделе, соответствующий внутренней части диаграммы (6.54)

$$\Pi_{\mu\nu}(r, t) = \mu \circlearrowleft_{\substack{\theta \\ r, t}}^{\nu}$$

Нам удобнее вычислять $\Pi_{\mu\nu}(x)$ в координатном представлении. Диаграмма для $\Pi_{\mu\nu}(x)$ расписывается так:

$$\Pi_{\mu\nu}(x) = -(-ie_0)^2 \text{Sp} \{ \gamma_\mu G(x) \gamma_\nu G(-x) \}.$$

След матрицы соответствует суммированию по всем спиновым состояниям виртуальной электрон-позитронной пары. Дополнительный знак «—» связан с тем, что $G^+(-t) = -G^-(t)$, где G^- — функция Грина позитрона (см. стр. 293). Как будет видно ниже, нам понадобятся расстояния, много меньшие комптоновской длины, поэтому можно в функциях Грина электрона и позитрона положить $m = 0$ (стр. 294),

$$\Pi_{\mu\nu}(x) = \frac{e_0^2}{4\pi^4} \text{Sp} \left(\gamma_\mu \frac{\hat{x}}{x^4} \gamma_\nu \frac{\hat{x}}{x^4} \right).$$

След вычисляется элементарно, с помощью соотношений $\gamma_\nu \hat{x} = -\hat{x} \gamma_\nu + 2x_\nu$, $\hat{x}^2 = x^2$, $\text{Sp}(\gamma_\mu \gamma_\nu) = 4g_{\mu\nu}$:

$$\Pi_{\mu\nu}(x) = \frac{e_0^2}{\pi^4} [2x_\mu x_\nu - x^2 g_{\mu\nu}] x^{-3}. \quad (6.55)$$

Заметим, что при $\tilde{x} \gg 1/m$ из выражений (6.25) и (6.24) для $G(x)$ имеем $G(\tilde{x}) \sim e^{-m\tilde{x}}$ и, следовательно, $\Pi_{\mu\nu}(\tilde{x})$ экспоненциально убывает при больших $\tilde{x}$:

$$\Pi_{\mu\nu}(\tilde{x}) \underset{\tilde{x} \gg 1/m}{\sim} e^{-2m\tilde{x}}.$$

Легко проверить, что выражение (6.55) удовлетворяет условию (6.53) во всех точках, кроме $x = 0$. При малых $x < r_0$ это выражение должно быть модифицировано либо за счет введения в теорию фундаментальных изменений, либо, если теория внутренне непротиворечива (см. следующий раздел), за счет учета более сложных процессов. Естественнее предположить, что эта модификация не нарушит калибровочной инвариантности.

Для дальнейшего нам достаточно потребовать, чтобы добавление к A_ν постоянного слагаемого не изменяло тока (см. (6.50)), т. е. чтобы исправленное выражение для $\Pi_{\mu\nu}(x)$ удовлетворяло условию

$$\int \Pi_{\mu\nu}(x) d^4x = 0. \quad (6.56)$$

Поскольку нас интересуют расстояния $x \gg r_0$, трудности, связанные с поведением $\Pi(x)$ при $x < r_0$, как мы увидим, можно обойти.

Для того чтобы найти интересующую нас величину $\Pi_{00}(\omega = 0, r) \equiv \Pi(r)$, следует проинтегрировать выражение (6.55) по t . Обход особенности, соответствующей $t^2 = r^2$, определяется тем, что к r^2 следует добавить бесконечно малую отрицательную мнимую добавку. Знак добавки определяется условием, чтобы $\Pi(\omega, r)$ соответствовала расходящейся волне $\Pi(\omega, r) \sim e^{i\omega r}$. Дифференцируя интеграл

$$I(r) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{t^2 - r^2 - i\delta} = \frac{\pi}{r}$$

по r^2 , легко получить

$$\Pi_{00}(\omega = 0, r) = -i \frac{e_0^2}{\pi^4} \int \frac{t^2 + r^2}{(t^2 - r^2)^4} dt = A \frac{e_0^2}{r^5}, \quad A = \frac{1}{4\pi^3}. \quad (6.57)$$

Для поправки к кулоновскому взаимодействию, используя (6.51) и (6.54'), находим

$$\begin{aligned} \delta V(r) &= -e_0^2 D_{00}^{(2)}(\omega = 0, r) = \\ &= -\frac{e_0^2}{4\pi} \int \frac{1}{|r - r_1|} \Pi(\rho) \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|r_1 + \rho|} dr_1 d\rho. \end{aligned}$$

Плотность наведенных зарядов равна

$$\rho_1(r) = -\frac{e_0}{4\pi} \int \Pi(\rho) \frac{1}{|r + \rho|} d\rho.$$

Или, используя (6.56),

$$\rho_1(r) = -\frac{e_0}{4\pi} \int \Pi(\rho) \left(\frac{1}{|r + \rho|} - \frac{1}{r} \right) d\rho.$$

В этом выражении следует разложить первое слагаемое в скобке в ряд по полиномам Лежандра $P_l\left(\frac{\rho r}{\rho r}\right)$. Используя $\Pi(\rho) = \Pi(|\rho|)$, получим

$$\rho_1(r) = e_0^3 A \int_r^{\sim 1/m} \frac{1}{\rho^5} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\rho} \right) \rho^2 d\rho = \frac{e_0^3 A}{6} \frac{1}{r^3}.$$

В δV ограничим интегрирование по r_1 снизу границей применимости теории r_0 . Подставляя ρ_1 в выражение для δV и разлагая $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^{-1}$ по полиномам Лежандра $P_l\left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_1}{rr_1}\right)$, получим с логарифмической точностью

$$V(r) = \frac{e_0^2}{4\pi r} \left(1 - \frac{e_0^2}{12\pi^2} \ln \frac{r^2}{r_0^2} \right). \quad (6.58)$$

Это выражение применимо при $r^2 \ll 1/m^2$, поскольку мы пользовались безмассовыми функциями Грина. На больших расстояниях логарифмический интеграл будет обрезаться комптоновской длиной, и мы получим закон Кулона с исправленным зарядом

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi r},$$

где

$$e^2 = e_0^2 \left(1 - \frac{e_0^2}{12\pi^2} \ln \frac{1}{m^2 r_0^2} \right); \quad (6.59)$$

величина e^2 по определению совпадает с квадратом наблюдаемого заряда электрона. Исключая из (6.58) затронуточный заряд e_0 , находим

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi r} \left(1 + \frac{e^2}{12\pi^2} \ln \frac{1}{m^2 r^2} + O(e^4) \right) = \frac{e_{\text{эфф}}^2}{4\pi r}.$$

Как и должно быть, эффективный заряд увеличивается при уменьшении r , так как при этом уменьшается экранирующее действие поляризационных зарядов.

Электромагнитное взаимодействие на сверхмалых расстояниях. Квантовая электродинамика, так же, как и теория 4-бозонного взаимодействия, рассмотренная выше,

является перенормируемой теорией (см. стр. 308). Электромагнитное взаимодействие характеризуется безразмерной константой — постоянной тонкой структуры $\alpha = e^2 = 1/137$.

Если ввести затравочный заряд e_0 и радиус обрезания L , то связь между наблюдаемым и затравочным зарядом имеет вид, аналогичный (6.59),

$$e^2 = e_0^2 f \left(e_0^2 \ln \frac{L}{m} \right). \quad (6.60)$$

Эта формула предполагает, что затравочный заряд e_0 мал, но величина $e_0^2 \ln \frac{L}{m}$ порядка единицы. Тогда в диаграммах теории возмущений можно оставить только главные члены $\left(e_0^2 \ln \frac{L}{m} \right)^n$. То, что такие члены возникают, видно из анализа диаграмм с помощью поворота Вика, аналогично тому, как это делалось в скалярной теории. Предположение о малости затравочного заряда сделано только для простоты — единственное, что нам понадобится в дальнейшем, это малость наблюдаемого заряда e .

Требование перенормируемости позволяет найти функцию $f(\xi)$ с точностью до неизвестной постоянной $f'(0)$. Как и в случае скалярной теории, единственная функция $e_0^2 f \left(e_0^2 \ln \frac{L}{m} \right)$, позволяющая скомпенсировать изменение радиуса обрезания δL изменением затравочного заряда δe_0 , имеет вид

$$e^2 = \frac{e_0^2}{1 - f'(0) e_0^2 \ln \frac{L}{m}}.$$

Мы получим эту формулу, пользуясь простыми и наглядными соображениями, из которых будет следовать, что для любого типа заряженных частиц

$$f'(0) < 0.$$

Рассмотрим потенциал $\phi(r)$ неподвижных затравочных зарядов e_0 , распределенных с плотностью $n_0(r)$. Потенциал ϕ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\Delta \phi = -e_0^2 (n_0 + n_1), \quad (6.61)$$

где n_1 — плотность зарядов, возникших в вакууме в результате поляризации под действием поля.

Согласно полученным выше результатам, вводя $\Pi_0(\rho) = \Pi(\rho) \frac{1}{e_0^2}$, получим

$$n_1(\mathbf{r}) = \int \Pi_0(\rho) (\varphi(\mathbf{r} + \rho) - \varphi(\mathbf{r})) d\rho. \quad (6.62)$$

Из этого соотношения следует, что полный заряд вакуума остается равным нулю $\int n_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0$. На расстояниях $\rho \gg \gg 1/m$, $\Pi_0(\rho)$ экспоненциально убывает, а на малых расстояниях, $\rho \ll 1/m$, согласно (6.57)

$$\Pi_0(\rho) = A |\rho|^{-5}, \quad A = 1/4\pi^3 > 0.$$

Разобьем интегрирование по ρ в (6.62) на три области: $\rho \ll r$, $\rho \sim r$ и $\rho \gg r$. В первой области можно разложить $\varphi(\mathbf{r} + \rho)$ по степеням ρ . Усредняя по углам ρ , получим

$$\overline{\varphi(\mathbf{r} + \rho) - \varphi(\mathbf{r})} =$$

$$= \bar{\rho}_i \partial_i \varphi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \overline{\rho_i \rho_k} \partial_i \partial_k \varphi(\mathbf{r}) + \dots \simeq \frac{1}{6} \rho^2 \Delta \varphi.$$

Вклад этой области в $n_1(\mathbf{r})$ равен

$$n_1(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{6} A \Delta \varphi \int_{r_0}^r \frac{d^3 \rho}{\rho^3} = \frac{2\pi}{3} A \Delta \varphi \ln \frac{r}{r_0}.$$

При $r > 1/m$ верхний предел следует заменить на $1/m$. Нижний предел определяется границей применимости теории. Как упоминалось на стр. 318, можно было бы взять в качестве нижнего предела произвольную точку $1/m > r_c > r_0$, которой соответствовал бы заряд e_c . В силу перенормируемости окончательный результат, выраженный через наблюдаемый заряд, не будет зависеть от e_c и r_c . Ниже мы в этом убедимся.

Область $\rho \gg r$ при $r > 1/m$ практически не вносит вклада в $n_1(\mathbf{r})$ из-за быстрого убывания $\Pi(\rho)$ при $\rho > > 1/m$. При $r < 1/m$ вклад этой области имеет порядок $A \varphi(\mathbf{r}) \frac{1}{\rho_1^2}$, $\rho_1 \gg r$, т. е. мал по сравнению с вкладом первой области.

Наконец, от области $r \sim \rho$, заменяя $\varphi(r + \rho) - \varphi(r) \rightarrow \rho \nabla \varphi \sim r \nabla \varphi$, получим слагаемое вида $\delta n_1 \sim \sim A \frac{r \nabla \varphi}{r^2}$. Коэффициент при этом слагаемом может быть найден из следующего соображения.

Как мы знаем из обычной электродинамики, плотность наведенных зарядов выражается через дивергенцию вектора поляризации, поэтому и $n_1(r)$ должна иметь вид дивергенции некоторого вектора $P = f(r) \nabla \varphi$, откуда $n_1 \sim \operatorname{div} P = f(r) \Delta \varphi + \frac{df}{dr} r \nabla \varphi$.

Таким образом, слагаемое, соответствующее области $r \sim \rho$, должно так дополнить в $n_1(r)$ член $\sim \Delta \varphi$, чтобы получилась дивергенция вектора. Окончательно имеем

$$n_1(r) = \frac{2\pi}{3} A \operatorname{div} \left(\ln \left(\frac{r}{r_0} \right) \nabla \varphi \right).$$

Рассмотрим сначала случай, когда плотность $n_0(r)$ распределена в области $r > 1/m$. Подставляя выражение для $n_1(r)$, в котором r следует заменить на $1/m$, в уравнение Пуассона, получаем

$$\Delta \varphi = -e^2 n_0(r), \quad (6.63)$$

где

$$e^2 = \frac{e_0^2}{1 + e_0^2 \frac{2\pi}{3} A \ln \frac{1}{mr_0}}. \quad (6.64)$$

Как видно из (6.63) e определяет взаимодействие между зарядами, расположенными далеко друг от друга и, следовательно, совпадает с наблюдаемым зарядом электрона. Выражение (6.64) устанавливает связь e^2 с квадратом затравочного заряда e_0^2 . Величина A , определяющая поляризуемость вакуума, положительна и, следовательно, наблюдаемый заряд меньше затравочного.

Рассмотрим теперь случай, когда затравочные заряды распределены в области $r < 1/m$ и, в частности, когда есть один заряд в начале координат: $n_0(r) = \delta(r)$. Запишем $n_1(r)$ в виде

$$n_1(r) = \frac{2\pi}{3} A [\operatorname{div} (\ln(mr) \nabla \varphi) - \ln(mr_0) \Delta \varphi].$$

Переносим второе слагаемое в левую часть уравнения

(6.61) и переходя к заряду e , получим

$$\Delta\varphi = -e^2 (n_0(\mathbf{r}) + n_R(\mathbf{r})). \quad (6.65)$$

Величину

$$n_R(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{3} A \operatorname{div} (\ln(mr) \nabla\varphi)$$

можно назвать перенормированной плотностью вакуумных зарядов.

Введем величину $\mathcal{D} = - \left(1 - e^2 \frac{2\pi}{3} A \ln \frac{1}{mr} \right) \nabla\varphi$, аналогичную вектору индукции. Уравнение (6.65) дает

$$\operatorname{div} \mathcal{D} = e^2 n_0(\mathbf{r}).$$

Таким образом, величина

$$\varepsilon = 1 - e^2 \frac{2\pi}{3} A \ln \frac{1}{mr} \quad (6.66)$$

представляет собой диэлектрическую восприимчивость вакуума на малых расстояниях от зарядов.

Найдем распределение вакуумных зарядов вокруг заряда e_0 , расположенного в начале координат: $n_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$.

Заряд внутри сферы радиуса r , $e^2(r)$, связан с φ очевидным соотношением — $\nabla\varphi = \frac{e^2(r)}{4\pi r^3} \mathbf{r}$. Используя выражение

$\mathcal{D} = \frac{e^2}{4\pi r^3} \mathbf{r}$, получаем

$$e^2(r) = \frac{e^2}{\varepsilon} = \frac{e^2}{1 - e^2 \frac{2\pi^2}{3} A \ln \frac{1}{mr}}. \quad (6.67)$$

При $r \geq 1/m$, $e^2(r)$ переходит в наблюдаемый заряд e^2 , а при $r = r_0$ в затравочный заряд. Так как полный заряд вакуума не изменяется при поляризации, то экранирующий вакуумный заряд, появившийся вблизи заряда e_0 , компенсируется равным зарядом, уходящим на бесконечность, так же как это происходит при внесении заряда в бесконечный диэлектрик.

Формально из (6.67) следует, что при

$$r \sim r_1 \sim \frac{1}{m} \exp \left(- \frac{3}{8\pi^2 A e^2} \right)$$

заряд $e^2(r)$ обращается в бесконечность.

На самом деле формула (6.67) на таких расстояниях неприменима. Действительно, когда мы находили $\Pi(r)$, мы предполагали, что безразмерный заряд $e^2(r)$ мал, и не учитывали возможную зависимость $\Pi(r)$ от $e^2(r)$.

В области $r \sim r_1$, когда $e^2(r) \sim 1$, родившиеся на отнесенных расстояниях $\sim r$ заряды, в свою очередь, могут взаимодействовать, причем это взаимодействие характеризуется зарядом $e^2(r)$. Такое естественное предположение, как мы увидим ниже, является другой формулировкой свойства перенормируемости.

Таким образом, «постоянная» A в (6.64) на самом деле может зависеть от r через $e^2(r)$:

$$A = A(e^2(r)).$$

Если учесть эту зависимость, то мы получим вместо (6.64)

$$e^2 = \frac{e_0^2}{1 + e_0^2 \frac{4\pi}{3} \int_{\ln r_0}^{\ln 1/m} A(e^2(\rho)) d \ln \rho}.$$

Исправленная формула для $e^2(r)$ будет иметь вид интегрального уравнения

$$e^2(r) = \frac{e^2}{1 + \frac{4\pi}{3} e^2 \int_{\ln 1/m}^{\ln r} d \ln \rho A(e^2(\rho))}. \quad (6.68)$$

Дифференцируя (6.68) по $\ln r$, можно получить дифференциальное уравнение, найденное впервые Гелл-Манном и Лоу

$$\frac{de^2(r)}{d \ln r} = -\beta(e^2(r)),$$

где функция Гелл-Манна — Лоу $\beta(e^2)$ связана с функцией $A(e^2)$ соотношением

$$\beta(e^2) = e^4 \frac{4\pi}{3} A(e^2). \quad (6.69)$$

Неявное решение этого уравнения имеет вид

$$\int_{e^2}^{e^2(r)} \frac{dx}{\beta(x)} = \ln \frac{1}{mr}. \quad (6.70)$$

Здесь введен наблюдаемый заряд $e^2 = e^2 (m^{-1})$. Связь наблюдаемого заряда с затравочным зарядом $e_0^2 = e^2 (r_0)$ дается (6.70) при $r \sim r_0$:

$$\int_{e^2}^{e_0^2} \frac{dx}{\beta(x)} = \ln \frac{1}{mr_0}. \quad (6.71)$$

Полученные формулы явно удовлетворяют соотношению перенормируемости и были найдены Гелл-Манном и Лоу, именно исходя из этого требования.

Приведенный качественный вывод позволяет понять физический смысл функции Гелл-Манна — Лоу (6.69) — она связана с поляризуемостью и поэтому не может быть отрицательна в области, где теория имеет смысл.

Заметим, что этот вывод можно уточнить. Мы предполагали, что $A(r) = A(e^2(r))$. В действительности на расстояниях r величина A определяется зарядом $e^2(r_1)$, где $r_1 \sim r$. Предположим сначала, что $\ln r_1 = \ln r + v$, где v — малая добавка. Тогда

$$A(e^2(r_1)) = A(e^2(r)) + \frac{dA}{de^2} \frac{de^2}{d \ln r} v = \Phi(e^2(r)).$$

Повторяя эту операцию, приходим к заключению, что $A = \Phi(e^2(r))$.

Функция Гелл-Манна — Лоу является важнейшей характеристикой теории поля, однако, к сожалению, до сих пор не существует иного способа для ее вычисления, кроме теории возмущений. Теория возмущений позволяет найти первые коэффициенты разложения $A(e^2)$, но не позволяет сделать заключений о свойствах $A(e^2)$ в интересующей нас области $e^2 \gtrsim 1$.

В принципе не исключено, что функция $A(e^2)$ обращается в нуль при некотором $e^2 = e_*^2$. Поскольку поляризуемость не может стать отрицательной, то функция $A(e^2)$ должна в этом случае иметь точку касания при $e^2 = e_*^2$.

Вопрос о возникновении нуля функции Гелл-Манна — Лоу имеет принципиальное значение, поскольку в этом случае можно построить строго локальную теорию с $r_0 = 0$. Действительно, при $r_0 \rightarrow 0$ интеграл в (6.71) должен расходиться. Это произойдет, если либо верхний e_0^2 , либо нижний e^2 предел совпадает с нулем e_*^2 функции $\beta(x)$.

Наблюдаемый заряд $e^2 = 1/137$ достаточно мал, чтобы доверять теории возмущений для функции $\beta(e^2)$, которая не имеет нуля при $e^2 = 1/137$. Если же e_0^2 совпадает с e_*^2 , то можно положить $r_0 = 0$, т. е. теория будет строго локальной.

Если функция Гелл-Манна — Лоу вообще не имеет нуля (что кажется наиболее вероятным), то при $r_0 \rightarrow 0$ затравочный заряд e_0^2 нужно положить равным ∞ для расходимости интеграла. Таким образом, в этом случае затравочное взаимодействие лишено смысла.

Экранировка взаимодействия (положительность коэффициента A в (6.64)) характерна для всех исследовавшихся до недавнего времени перенормируемых теорий: электродинамика, скалярное поле (взаимодействие $\sim \lambda\phi^4$), теория Юкавы (взаимодействие $\sim \bar{\Psi}\Psi\phi$) и т. д. В течение двадцати лет экранировка затравочного взаимодействия казалась неотъемлемым свойством перенормируемых теорий. При любом конечном взаимодействии на больших расстояниях взаимодействие на малых расстояниях велико или даже обращается в бесконечность, что делает бесплодным само понятие затравочного взаимодействия.

Экранировка взаимодействия часто выдвигалась в качестве аргумента против локальной теории поля. Стало интенсивно развиваться другое направление теории, в котором эта трудность обходится. Была сделана попытка сформулировать теорию в виде соотношений, вытекающих только из общих свойств: из унитарности, причинности и т. д. (так называемая теория S -матрицы). Однако, как мы уже упоминали, эту схему не удастся сформулировать в виде замкнутой теории.

В последнее время открылась новая возможность. Была обнаружена перенормируемость калибровочно-инвариантной теории, предложенной Янгом и Миллсом еще в 1954 году. Теории этого типа являются обобщением электродинамики: фермионные поля взаимодействуют с несколькими типами векторных полей — глюонов. В отличие от фотонов глюоны заряжены, т. е. взаимодействуют между собой. Структура лагранжиана однозначно определяется требованиями перенормируемости и калибровочной инвариантности. Теория содержит только одну безразмерную константу, определяющую как взаимодействие фермионов

с глюонами, так и взаимодействие глюонов между собой. Затравочные массы глюонов равны нулю, а массы фермионов могут быть отличны от нуля.

Сохраняющийся «заряд» в отличие от электрического заряда, является векторным оператором, компоненты которого коммутируют как компоненты момента. Поэтому закон сложения поляризационных «зарядов» сложнее, чем в электродинамике. Как показывает расчет, в зависимости от соотношения между числом фермионных и глюонных полей, возможны как экранировка, так и «антиэкранировка» внесенного в вакуум «заряда». При не слишком большом числе фермионных полей осуществляется антиэкранировка.

В такой теории свойство перенормируемости также приводит к логарифмическому закону (6.64) для эффективной константы взаимодействия, но с отрицательным коэффициентом A . Это означает, что эффективное взаимодействие растет по мере увеличения расстояния. В пределе сверхмалых расстояний взаимодействие исчезает (так называемая «асимптотическая свобода»). Это явление предполагается использовать для объяснения парадокса физики сильных взаимодействий. Как известно, спектр масс адронов, а также их электромагнитная структура, которая изучена с помощью глубоко неупругих электрон-адронных реакций, хорошо описываются моделью невзаимодействующих кварков*). Вместе с тем свободные кварки не наблюдались, несмотря на многолетние поиски. Этот парадокс можно было бы объяснить, предположив, что взаимодействие кварков описывается теорией Янга — Миллса, т. е. исчезает на малых расстояниях и не позволяет ни кваркам, ни глюонам расходиться на большие расстояния.

Итак, чисто теоретические вопросы перенормируемости и взаимодействия на сверхмалых расстояниях могут оказаться решающими для понимания природы сильных взаимодействий.

*) Р. Фейнман, «Взаимодействие фотонов с адронами», «Мир», Москва, 1975.

Аркадий Бейнусович Мигдал

КАЧЕСТВЕННЫЕ МЕТОДЫ
В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ