

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Физический факультет

В. Г. Зелевинский  
**Квантовая физика**  
**Том 3**

Реакции, релятивизм. Квантовая теория многих тел.  
Квантовый хаос

Учебное пособие

Новосибирск  
2015

УДК 539.1.01+539.182+539.18

ББК В318

З 48

Редактор перевода  
д-р физ.-мат. наук В. Ф. Дмитриев

Рецензент  
д-р физ.-мат. наук, проф. В. Г. Сербо

**З 48** **Зелевинский, В. Г.** Квантовая физика: учеб. пособие / В. Г. Зелевинский; Новосиб. гос. ун-т. — Новосибирск : РИЦ НГУ, 2015.— Т. 3. Реакции, релятивизм. Теория многих тел. Квантовый хаос. — 548 с.

ISBN 978-5-4437-0386-2

Учебное пособие содержит современное изложение основных фундаментальных положений квантовой физики с их применением в атомной и ядерной физике. В третьем томе курса излагается квантовая теория рассеяния и реакций, уравнения релятивистской квантовой механики. Подробно обсуждается уравнение Дирака и далее физика нейтрино и каонов. Вместе с дискретными симметриями вводится понятие изоспина и обсуждается физика систем тождественных частиц. Подробно рассматриваются атомные и ядерные конфигурации с использованием формализма вторичного квантования. Обсуждается теория взаимодействующих бозонов и фермионов включая теорию коллективных возбуждений и теорию сверхпроводимости. Вводится понятие матрицы плотности, обсуждается квантовый хаос и квантовая запутанность. Издание предназначено для студентов старших курсов физических и физико-технических факультетов.

**УДК 539.1.01+539.182+539.18**  
**ББК В318**

© Новосибирский государственный университет, 2015  
© В. Г. Зелевинский, 2015

All Rights Reserved. Authorised translation from the English language edition by Wiley-VCH Verlag GmbH & KGaA. Responsibility for the accuracy of the translation rests solely with Licensee Name and is not the responsibility of Wiley-VCH Verlag GmbH & KGaA. No part of this book may be reproduced in any form without the written permission of the original copyright holder, Wiley-VCH Verlag GmbH & KGaA.

ISBN 978-5-4437-0386-2

© 2011 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany

All rights reserved (including those of translations into other languages). No part of this book may be reproduced in any form – by photoprinting, microfilm, or any other means – nor transmitted or translated into a machine language without written permission from the publishers. Registered names, trademarks, etc. used in this book, even when not specifically marked as such, are not to be considered unprotected by law.





## Оглавление

Предисловие редактора перевода	11
Предисловие автора к русскому изданию	12
Предисловие	13
<b>1 Основы квантовой теории рассеяния</b>	<b>17</b>
1.1. Рассеяние и наблюдаемые	17
1.2. Классическое рассеяние	18
1.3. Матрица рассеяния	22
1.4. Вероятность перехода в единицу времени	24
1.5. Борновское приближение	25
1.6. Уравнение непрерывности	28
1.7. Упругое рассеяние	29
1.8. Унитарность и оптическая теорема	31
1.9. Функция Грина	34
1.10. Борновский ряд	37
1.11. Применимость борновского приближения	40
1.12. Рассеяние при высоких энергиях	42
<b>2 Метод парциальных волн</b>	<b>47</b>
2.1. Анализ парциальных волн	47
2.2. Упругое и неупругое сечения	49
2.3. Упругие фазы рассеяния	51
2.4. Аналитичность	52
2.5. Рассеяние при низких энергиях: примеры	54
2.6. Фазы и их зависимость от энергии	58
2.7. Длина рассеяния	62
2.8. Резонансное рассеяние при низких энергиях	65

2.9.	Эффективный радиус . . . . .	69
2.10.	Рассеяние при наличии спин-орбитального взаимодействия . .	70
2.11.	Поляризация и азимутальная асимметрия . . . . .	74
<b>3</b>	<b>Дополнительные вопросы теории рассеяния</b>	<b>79</b>
3.1.	Классическое и квантовое рассеяние . . . . .	79
3.2.	Квазиклассическая амплитуда . . . . .	80
3.3.	Квазиклассические фазы . . . . .	82
3.4.	Связь с приближением эйконала . . . . .	85
3.5.	Дифракционное рассеяние . . . . .	87
3.6.	Дифракция на чёрной сфере . . . . .	89
3.7.	Оптическая модель . . . . .	92
3.8.	Многократное рассеяние в среде . . . . .	95
3.9.	Когерентное рассеяние на кристаллах . . . . .	99
<b>4</b>	<b>Реакции, распады и резонансы</b>	<b>103</b>
4.1.	Каналы реакции . . . . .	103
4.2.	Матрица рассеяния для многоканальных реакций . . . . .	105
4.3.	Детальное равновесие . . . . .	107
4.4.	Сечения для медленных частиц . . . . .	109
4.5.	Пороги и унитарность . . . . .	111
4.6.	Изолированные резонансы . . . . .	115
4.7.	Квантовый эффект Зенона . . . . .	117
4.8.	Резонансное сечение . . . . .	123
4.9.	Унитарность и сверхизлучение . . . . .	125
4.10.	Угловой момент и чётность . . . . .	127
4.11.	Узкий резонанс как составная система . . . . .	128
4.12.	Интерференция резонанса и потенциального рассеяния . . . .	130
<b>5</b>	<b>На пути к релятивистской квантовой механике</b>	<b>135</b>
5.1.	Ограничения подхода . . . . .	135
5.2.	Релятивистские единицы . . . . .	136
5.3.	Преобразования Лоренца . . . . .	136
5.4.	Энергия и импульс . . . . .	138
5.5.	Тензоры и обозначения . . . . .	139
5.6.	Уравнение Клейна—Гордона . . . . .	143
5.7.	Сохранение тока . . . . .	145
5.8.	Частицы и античастицы . . . . .	147
5.9.	Электромагнитное поле . . . . .	148

5.10.	Принцип минимальности электромагнитной связи . . . . .	150
5.11.	Фотопоглощение при высоких энергиях . . . . .	153
5.12.	Ядерный фотоэффект . . . . .	156
5.13.	Оценки процессов в КЭД . . . . .	158
<b>6</b>	<b>Уравнение Дирака: формализм</b>	<b>163</b>
6.1.	Введение уравнения Дирака . . . . .	163
6.2.	Ковариантная форма и алгебра . . . . .	165
6.3.	Ток . . . . .	168
6.4.	Зарядовое сопряжение . . . . .	169
6.5.	Релятивистские преобразования . . . . .	172
6.6.	Оператор спина . . . . .	174
6.7.	Билинейные ковариантные комбинации . . . . .	176
<b>7</b>	<b>Уравнение Дирака: решения</b>	<b>181</b>
7.1.	Свободное движение . . . . .	181
7.2.	Море Дирака . . . . .	182
7.3.	Решения для свободного движения . . . . .	184
7.4.	Полный набор решений . . . . .	187
7.5.	Уравнение Паули . . . . .	190
7.6.	Эффекты второго порядка . . . . .	192
7.7.	Центральное поле . . . . .	194
7.8.	Кулоновское поле . . . . .	198
7.9.	Статическое однородное магнитное поле . . . . .	203
<b>8</b>	<b>Дискретные симметрии, нейтрино и каоны</b>	<b>207</b>
8.1.	Пространственная инверсия для дираковской частицы . . . . .	207
8.2.	Преобразование обращения времени . . . . .	210
8.3.	<i>СРТ</i> -преобразование . . . . .	211
8.4.	Безмассовые частицы . . . . .	212
8.5.	Нейтрино в безмассовом пределе . . . . .	214
8.6.	Ещё о несохранении чётности . . . . .	217
8.7.	Осцилляции нейтрино . . . . .	219
8.8.	Нейтрино Майорана . . . . .	222
8.9.	Странность . . . . .	224
8.10.	Нейтральные каоны и <i>СР</i> -чётность . . . . .	226
8.11.	Нейтральные каоны и квантовая регенерация . . . . .	229
<b>9</b>	<b>Тождественные частицы</b>	<b>233</b>
9.1.	Неразличимые частицы . . . . .	233

9.2.	Перестановочная симметрия . . . . .	234
9.3.	Бозоны и фермионы . . . . .	236
9.4.	Волновые функции невзаимодействующих частиц . . . . .	239
9.5.	Двухнуклонные состояния . . . . .	243
9.6.	Рассеяние тождественных частиц . . . . .	254
9.7.	Интерферометрия интенсивностей . . . . .	259
<b>10</b>	<b>Изоспин</b>	<b>263</b>
10.1.	Введение изоспина . . . . .	263
10.2.	Изоспиновая инвариантность . . . . .	265
10.3.	Изоспин системы многих тел . . . . .	267
10.4.	Изоспин и пространственно-спиновая симметрия . . . . .	268
10.5.	Беглый взгляд на более общую картину . . . . .	271
10.6.	Соотношения между сечениями . . . . .	274
<b>11</b>	<b>Вторичное квантование</b>	<b>281</b>
11.1.	Представление чисел заполнения . . . . .	281
11.2.	Введение во вторичное квантование . . . . .	283
11.3.	Статистика Бозе . . . . .	285
11.4.	Ферми-статистика . . . . .	287
11.5.	Алгебраические соотношения . . . . .	288
11.6.	Одночастичные операторы . . . . .	290
11.7.	Двухчастичные операторы . . . . .	294
11.8.	Межчастичное взаимодействие в базисе плоских волн . . . . .	296
11.9.	Межчастичное взаимодействие в конечной системе . . . . .	299
<b>12</b>	<b>Атомные и ядерные конфигурации</b>	<b>303</b>
12.1.	Приближение независимых частиц . . . . .	303
12.2.	Добавляя вращательную инвариантность . . . . .	304
12.3.	Многочастичные конфигурации . . . . .	307
12.4.	Обменное взаимодействие . . . . .	312
12.5.	Двухэлектронная система . . . . .	314
12.6.	Атом гелия: оптический спектр . . . . .	318
12.7.	Правила Хунда . . . . .	320
12.8.	Симметрия частица—дырка . . . . .	322
12.9.	Оболочечная структура . . . . .	324
<b>13</b>	<b>Фермионы</b>	<b>327</b>
13.1.	Идеальный Ферми-газ . . . . .	327
13.2.	Спиновый парамагнетизм . . . . .	334

13.3.	Орбитальный диамагнетизм . . . . .	336
13.4.	Вводим среднее поле . . . . .	339
13.5.	Статистическая модель . . . . .	341
13.6.	Экранирование в электронном газе . . . . .	345
13.7.	Приближение Хартри–Фока . . . . .	347
13.8.	Пространственно однородные системы . . . . .	350
13.9.	Кулоновский газ . . . . .	353
13.10.	Теория функционала плотности . . . . .	356
<b>14</b>	<b>Коллективные возбуждения</b>	<b>359</b>
14.1.	Линейная цепочка . . . . .	359
14.2.	Фононы . . . . .	364
14.3.	Фононные моды . . . . .	366
14.4.	Спиновые волны . . . . .	370
14.5.	Возбуждения частица–дырка . . . . .	377
14.6.	Флуктуации плотности . . . . .	380
14.7.	Приближение случайных фаз . . . . .	382
14.8.	Электрон-фононное взаимодействие . . . . .	383
<b>15</b>	<b>Бозоны</b>	<b>389</b>
15.1.	Бозе–Эйнштейновская конденсация . . . . .	389
15.2.	Конденсат как резервуар; химический потенциал . . . . .	392
15.3.	Слабо неидеальный газ . . . . .	394
15.4.	Фононы . . . . .	396
15.5.	Сверхтекучесть . . . . .	399
15.6.	Канонические преобразования . . . . .	401
15.7.	Фононы как волны плотности . . . . .	404
15.8.	Приближение локальной плотности . . . . .	406
15.9.	Неоднородный газ . . . . .	409
<b>16</b>	<b>Спаривание фермионов и сверхпроводимость</b>	<b>413</b>
16.1.	Спаривание . . . . .	413
16.2.	Пары и сеньорити . . . . .	416
16.3.	Мультипольные моменты в схеме сеньорити . . . . .	419
16.4.	Вырожденная модель и квазиспин . . . . .	420
16.5.	Каноническое преобразование . . . . .	424
16.6.	Теория БКШ. Пробная волновая функция . . . . .	428
16.7.	Минимизация энергии . . . . .	431
16.8.	Энергетическая щель . . . . .	433

16.9.	Спектр возбуждений . . . . .	437
16.10.	Энергия конденсации . . . . .	441
16.11.	Амплитуды переходов . . . . .	443
<b>17</b>	<b>Матрица плотности</b>	<b>447</b>
17.1.	Смешанные состояния и матрица плотности . . . . .	447
17.2.	Свойства матрицы плотности . . . . .	449
17.3.	Тепловое равновесие . . . . .	453
17.4.	Поляризационная матрица плотности . . . . .	457
17.5.	Приложение к рассеянию . . . . .	462
17.6.	Энтропия ансамбля . . . . .	465
17.7.	Эволюция матрицы плотности . . . . .	468
17.8.	Ещё о линейном отклике . . . . .	470
17.9.	Электропроводность . . . . .	471
<b>18</b>	<b>Квантовый хаос</b>	<b>475</b>
18.1.	Классический и квантовый хаос . . . . .	475
18.2.	Локальная спектральная статистика: распределение Пуассона	478
18.3.	Гауссов ортогональный ансамбль . . . . .	484
18.4.	Распределение межуровневых интервалов . . . . .	487
18.5.	ГОА и информация . . . . .	490
18.6.	Классы универсальности . . . . .	492
18.7.	Полукруговой закон . . . . .	495
18.8.	Хаотические собственные функции . . . . .	502
18.9.	Сложность и информационная энтропия . . . . .	507
18.10.	Распределение Портера—Томаса . . . . .	510
<b>19</b>	<b>Квантовые запутанные состояния</b>	<b>513</b>
19.1.	Квантовая запутанность . . . . .	513
19.2.	Телепортация . . . . .	515
19.3.	Математика запутанности . . . . .	517
19.4.	Квантовые неравенства Белла . . . . .	520
19.5.	Парадокс ЭПР(Б) и скрытые переменные . . . . .	523
19.6.	Экспериментальные тесты . . . . .	526
19.7.	Декогерентность и парадокс измерения . . . . .	527
	<b>Список литературы</b>	<b>533</b>
	<b>Предметный указатель</b>	<b>543</b>

## Предисловие редактора перевода

Двухтомный курс квантовой физики известного теоретика, специалиста по квантовой теории многих тел, профессора Университета штата Мичиган Владимира Зелевинского, изданный в 2011 г., является уникальным по широте охвата материала. В курсе обсуждаются квантовые эффекты, начиная с субатомных и атомных масштабов и кончая масштабами макроскопических тел. Ещё одно достоинство пособия — многоуровневость изложения. Данным учебником может пользоваться как начинающий изучать квантовую механику, так и более продвинутый читатель, желающий углубить своё знание квантовой теории.

Для удобства изучения курса издание на русском языке сделано в трёх томах, в соответствии с семестровыми программами курсов на физическом факультете НГУ. Перевод третьего тома был выполнен: главы 1–8 и 10–12 — В. Ф. Дмитриевым, глава 13 — В. Я. Ивановым, главы 9, 14–17 — А. Г. Грозиным, главы 18–19 — О. В. Жировым. Вёрстка тома — В. Ф. Дмитриев.

*В. Ф. Дмитриев*

## Предисловие автора к русскому изданию

Книга, которую читатель держит в руках, была издана три года назад (Wiley-VCH, 2 тома) на английском языке. Она «выросла» из лекций по квантовой механике, которые автор читал на физическом факультете Новосибирского университета, начиная с 1965 г. Однако эта книга заметно «повзрослела» и по стилю, и по содержанию (не говоря об объёме), благодаря новому опыту, приобретённому автором в Дании (Niels Bohr Institute) и США (Michigan State University). Кажется, и студенты сейчас другие...

Я благодарен Новосибирскому университету и его ректору Михаилу Федоруку за помощь в издании. Большая работа группы переводчиков, руководимая и координируемая Владимиром Дмитриевым, сделала возможным издание в сравнительно короткий срок. Особой благодарности заслуживает Альфия Нестеренко, вложившая так много усилий в организацию издания.

Остаётся надеяться, что и новому поколению студентов (как и преподавателей) книга будет полезной.

г. Ист-Лансинг, Мичиган. Февраль 2014 г.

*Владимир Зелевинский*

## Предисловие

Эта книга основана на лекциях, которые читались в течение многих лет в России (Новосибирский государственный университет), США (Университет штата Мичиган) и Дании (Институт Нильса Бора, Копенгаген). Российский опыт был вначале обобщён в двух небольших пособиях с рукописными формулами и много позже — в книге «Лекции по квантовой механике». Но в том виде книга абсолютно не годилась для аспирантского курса в американском университете. Нынешнее пособие является полностью новым, хотя и сохраняет дух оригинала. Два тома текста логически соответствуют двум семестрам курса.

Как стало ясно после многих лет преподавания аспирантских курсов, необходимых для получения степени доктора философии, основной проблемой является то, что аспиранты, приходя в большой университет (такой как Университет штата Мичиган) с очень разным уровнем подготовки, должны в течение курса овладеть некоторым общим уровнем знаний, который позволил бы им продвигаться дальше к более сложным вопросам современной науки. Я пытался использовать различные популярные учебники, но каждый раз было необходимо дополнять их собственными заметками. В конце концов стало ясно, что легче и полезнее последовательно полагаться на свой собственный текст, который должен быть правильно упорядочен, снабжён задачами и дополнительным материалом, дающим возможность преподавателю отобрать его для более продвинутых студентов.

Книга начинается с самых фундаментальных принципов квантовой теории и продолжается методом, который представляется мне наиболее логичным и наиболее подходящим для такой разноуровневой аудитории. Сначала в пособии рассматривается много задач, которые не требуют полного квантового формализма, но позволяют студентам приобрести некоторый опыт квантового мышления. Только после этого вводится фундаментальное уравнение Шрёдингера и мы переходим к более широкому кругу приложений во всех областях квантовой физики. Задачи даются внутри текста; их решение или хотя бы понимание абсолютно необходимо. Имеется много как тради-

ционных задач, так и новых задач, связанных с современным развитием физики. Текст написан так, что каждая тема содержит несколько уровней сложности, чтобы преподаватель мог самостоятельно выбирать глубину изложения предмета. При тщательном отборе этот материал может также использоваться и на младших курсах.

Объём и границы этой книги поставили меня перед трудным выбором исключить некоторые важные и интересные вопросы. В пособии имеются темы, которые обычно не входят в общие курсы, но, по моему мнению, должны присутствовать в современных учебных планах — например, когерентные и сжатые состояния и их макроскопические аналоги, тензорные операторы и их приложения, некоторые вопросы релятивистской квантовой механики и теории рассеяния, свойства взаимодействующих многочастичных систем, квантовый хаос и запутанность. Дополнительный материал выходит далеко за пределы стандартных курсов и должен позволить лектору осуществить соответствующий отбор для конкретной аудитории. Параллельно можно работать со студентами более высокого уровня над современными проблемами, что я обычно и делал. По тексту разбросаны также несколько математических отступлений о методах, неизвестных в большинстве случаев студентам, например, таких, как комплексный анализ и элементы теории групп (эти разделы помечены звёздочкой). Поэтому текст является самодостаточным и не требует привлечения дополнительных источников. Тем не менее в конце каждой главы даётся список дополнительной литературы, включающий ссылки на текущие научные журналы. Я полагаю, очень важно продемонстрировать, что квантовая теория не содержит никаких магических трюков и что всё может быть выведено и объяснено на доске прямо на глазах у студентов.

Этот подход был испытан в течение нескольких лет и оказался успешным, хотя в первоначальный период ошибки были неизбежны. Успех, конечно, в высшей степени зависит от усиленной работы студентов, которая, в свою очередь, инициируется их интересом к предмету.

В течение этих лет я очень много полезного получил из дискуссий с замечательными учёными в разных странах. К сожалению, нет возможности перечислить вклад каждого из них. Но я хотел бы выразить особую признательность ушедшему от нас Карлу Гооде, который постоянно поддерживал и убеждал меня написать лекции в форме, пригодной для публикации. Я очень благодарен Роману Сенькову и Александру Воля за их полезное участие. Дружеское расположение и постоянная помощь издателей, в особенности Валери Мольер, Ани Щёртнер и Петры Мёвс, были неоценимы.

В таком внушительном тексте вряд ли возможно избежать недосказанностей и ошибок. Я был бы особенно благодарен читателям за любой конструктивный отклик.

Наконец, в течение тех лет, когда мои вечера были посвящены написанию этого курса, я постоянно получал большую поддержку со стороны сына, дочери и их семей. Я в бесконечном долгу перед моей женой Верой, чьё чудесное терпение сделало возможным выполнение этой работы.

г. Ист-Лансинг, Мичиган, июнь 2010 г.

*Владимир Зелевинский*



Одним из наиболее фундаментальных инструментов физики, используемых для исследования атомных и субатомных явлений, является рассеяние известных частиц на исследуемом образце.

*Р.Л. Либов «Введение в квантовую механику»*

## Глава 1

# Основы квантовой теории рассеяния

### 1.1. Рассеяние и наблюдаемые

Львиная доля наших знаний о взаимодействии частиц с другими частицами, ядрами, атомами, молекулами и конденсированным веществом получена из экспериментов по рассеянию. Теоретическая формулировка задачи рассеяния непосредственно приспособлена к типичной постановке эксперимента.

Схематически процесс рассеяния протекает следующим образом. Пучок частиц в определенном начальном состоянии  $|i\rangle$  получают из удалённого источника. Пучок характеризуется импульсом  $\mathbf{p}$  частиц пучка, *снарядов*, или функцией распределения по импульсам, а также всеми внутренними квантовыми числами, такими как спин, которые также могут быть заданы вероятностным образом. Частицы пучка считаются находящимися на *энергетической поверхности*, или на *массовой поверхности*, то есть это реальные свободно движущиеся частицы с обычным соотношением между энергией и импульсом, в отличие от *внемассовых* виртуальных частиц, которые появляются в промежуточных короткоживущих состояниях, см. разд. I.5.10. Строго говоря, мы никогда не имеем дело с плоской волной, имеющей определенный импульс. Частицы пучка должны описываться *волновыми пакетами*, имеющими разброс импульсов и координат в соответствии с принципом неопределенности. Но регистрирующий прибор имеет конечные размеры, и обычно неопределенность импульса перекрывается угловым разрешением детектора, хотя могут быть редкие ситуации, когда структура пакета имеет решающее значение. Во всяком случае, можно использовать идеализированные плоские волны в качестве базиса, который позволяет восстановить рассеяние пакета, пользуясь принципом суперпозиции.

Исходный пучок вступает в взаимодействие с *мишенью*, которой, в частности, может быть еще один пучок (эксперименты на *встречных пучках*).

Взаимодействие происходит в микроскопической области, где мы не можем установить наши детекторы. После взаимодействия продукты снова свободные частицы, может быть другого типа или в других внутренних состояниях. Регистрируется только набор характеристик свободных частиц в конечном состоянии  $|f\rangle$ . Для данного начального состояния  $|i\rangle$  задачей квантовой теории рассеяния является предсказание вероятности различных возможных конечных состояний. В конечном счёте, используя эмпирические данные, мы стараемся извлечь информацию о механизме взаимодействия и структуре взаимодействующих частиц. Здесь мы ограничимся столкновениями двух тел, хотя в плотной среде одновременное взаимодействие большего числа частиц может иметь важное значение; есть также многочастичные силы, которые не проявляются в парных взаимодействиях. Количество конечных продуктов может быть произвольным, но мы в основном будем рассматривать типичные процессы с двумя начальными и двумя конечными частицами.

В гл. II.12 обсуждалось рассеяние как приложение зависящей от времени теории возмущений. На практике, особенно когда теория возмущений неприменима, проще использовать *не зависящую от времени* формулировку проблемы. Пусть имеется первоначальный пучок со *стационарной плотностью потока* частиц  $j_i$  (число частиц, проходящих через единицу площади в единицу времени). Экспериментальный детектор регистрирует определенное количество событий, соответствующих конечному состоянию  $|f\rangle$ , со скоростью  $\dot{w}_{fi}$  (количество событий в единицу времени). Отношение

$$\sigma_{fi} = \frac{\dot{w}_{fi}}{j_i} \quad (1.1)$$

измеряет вероятность рассматриваемого процесса  $i \rightarrow f$  для одной падающей частицы. Имея размерность площади, эта характеристика называется эффективным *сечением*. Будучи основными величинами, получаемыми в экспериментах по рассеянию, сечения характеризуют элементарные акты взаимодействия, не зависящие от интенсивности пучка.

## 1.2. Классическое рассеяние

Напомним задачу об упругом рассеянии в классической механике [1], § 18. В парном столкновении мы всегда используем систему центра масс, где сталкивающиеся частицы сближаются друг с другом и после взаимодействия расходятся в противоположных направлениях под углом  $\theta$  по отношению к первоначальному движению.

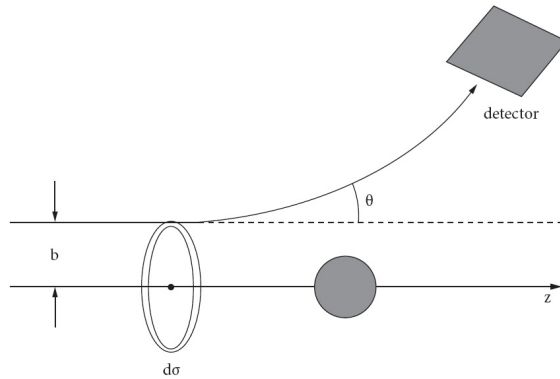


Рис. 1.1. Поперечное сечение и прицельный параметр

Классически угол рассеяния  $\theta = \theta(b)$  определяется *прицельным параметром*  $b$ , связанным с орбитальным моментом  $\ell$  как  $\hbar\ell = mvb$ , где  $v$  - относительная скорость вдали от рассеивателя и  $m$ -приведенная масса снаряда и частицы мишени. Все частицы падающей волны, летящие в кольце между  $b$  и  $b + db$ , рис. 1.1, будут отклоняться на угол между  $\theta$  и  $\theta + d\theta$ . Поэтому *эффективное дифференциальное сечение* есть площадь кольца

$$d\sigma = 2\pi b db = 2\pi b \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\theta; \quad (1.2)$$

символ абсолютного значения вставлен для того, чтобы всегда иметь положительные сечения. Конкретные свойства потенциалов скрыты в зависимости  $\theta(b)$ . *Полное сечение* получается интегрированием дифференциального сечения по всем прицельным параметрам или, эквивалентно, по телесному углу рассеянных частиц. Поперечное сечение зависит от характера взаимодействия между снарядом и мишенью и от энергии  $E$  относительного движения.

### Задача 1.1

Найти классические дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния точечной частицы массы  $m$  с кинетической энергией  $E$  на сферически-симметричной потенциальной яме радиуса  $R$  и глубины  $U_0$ .

### Решение.

Начальное состояние определяется прицельным параметром  $b$  и скоростью  $v = \sqrt{2E/m}$ . Классическое рассеяние возможно только для  $b < R$ . *Полное сечение* рассеяния равно площади взаимодействия, перпендикуляр-

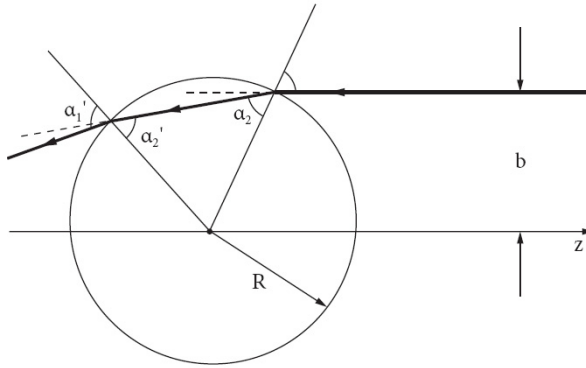


Рис. 1.2. Геометрия рассеяния частицы на сферической потенциальной яме

ной траектории частицы, т.е. площади геометрического сечения мишени

$$\sigma = 2\pi \int_0^R b db = \pi R^2. \quad (1.3)$$

То же самое справедливо и для непроницаемой сферы (полное отражение частицы).

На границе сферы мы имеем скачок потенциала от нуля до отрицательного значения  $-U_0$ . Только нормальная составляющая скорости частиц будет меняться (нет тангенциальной силы). Траектории, следовательно, будут *преломляться* на поверхности. Пусть угол падения и угол преломления равны, соответственно,  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  (рис. 1.2). Тогда наружная  $v$  и внутренняя  $v'$  скорости связаны *законом Снелла*

$$v \sin \alpha_1 = v' \sin \alpha_2. \quad (1.4)$$

Угол падения определяется прицельным параметром

$$\sin \alpha_1 = \frac{b}{R}. \quad (1.5)$$

Энергия частицы сохраняется

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{mv'^2}{2} - U_0, \quad (1.6)$$

внутри ямы частица движется быстрее, поэтому  $\alpha_2 < \alpha_1$ ,

$$\frac{\sin \alpha_2}{\sin \alpha_1} = \frac{v}{v'} = \sqrt{\frac{E}{E + U_0}} \quad (1.7)$$

(обратная величина играет роль *показателя преломления*). Угол отклонения  $\alpha_2 - \alpha_1$  удваивается в точке выхода, так что полный угол рассеяния  $\theta = 2(\alpha_2 - \alpha_1)$ . Совместно с уравнением (1.7) это даёт

$$\cos \frac{\theta}{2} - \cot \alpha_1 \sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{E}{E + U_0}}. \quad (1.8)$$

Исключая  $\alpha_1$  с помощью уравнения (1.5), находим связь между прицельным параметром и углом рассеяния

$$b^2 = R^2 \frac{(E + U_0) \sin^2(\theta/2)}{2E + U_0 - 2\sqrt{E(E + U_0)} \cos(\theta/2)}. \quad (1.9)$$

Для *центрального* столкновения  $b = 0$ , угол рассеяния  $\theta = 0$ , в то время как касательное столкновение  $b \rightarrow R$  приводит к максимальному углу рассеяния  $\theta_m$ :

$$\cos \frac{\theta_m}{2} = \sqrt{\frac{E}{E + U_0}}. \quad (1.10)$$

Дифференциальное сечение получается, в соответствии с определением (1.2), дифференцированием уравнения (1.9) по  $\theta$ . Результат может быть представлен как

$$d\sigma = \frac{\pi R^2}{2c} \frac{(c - c_m)(1 - cc_m)}{1 + c_m^2 - 2cc_m} d\theta, \quad (1.11)$$

где

$$c \equiv \cos \frac{\theta}{2}, \quad c_m \equiv \cos \frac{\theta_m}{2}. \quad (1.12)$$

Можно проверить, что, в соответствии с (1.3),

$$\sigma = \int_0^{\theta_m} \sin \theta d\theta \frac{d\sigma}{d\theta} = \pi R^2. \quad (1.13)$$

В пределе очень высоких энергий,  $E \gg U_0$ , конус (1.10) сужается, и рассеяние происходит по существу в направлении вперед. Здесь показатель преломления близок к 1, а препятствие не меняет траектории. При малой

энергии показатель преломления велик и рассеяние становится все более и более изотропным  $\theta_m \rightarrow \pi$ .

С учетом квазиклассического квантования орбитального момента можно ввести *парциальное* сечение для данного  $\ell$  (рис.1.1):

$$\sigma_\ell = \pi(b_{\ell+1}^2 - b_\ell^2) = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1). \quad (1.14)$$

Прицельный параметр  $\ell$ -той парциальной волны в  $\ell$  раз больше, чем длина волны  $\lambda \sim 1/k$ ; здесь и ниже  $k = mv/\hbar$  есть волновой вектор относительного движения. Таким образом, парциальное сечение (1.14) определяется длиной волны падающего пучка.

Наша цель заключается в формулировке квантовой теории рассеяния и нахождении связи эмпирических сечений с основными характеристиками взаимодействия. Классическая картина будет являться частным случаем общей теории.

### 1.3. Матрица рассеяния

Картина (рис. 1.1) подразумевает *стационарную* постановку рассеяния с постоянным падающим пучком, поставляющим новые частицы. Другой подход рассматривает *временную эволюцию* начального квантового состояния, которое принадлежит сплошному энергетическому спектру. Состояние было приготовлено в далёком прошлом,  $t \rightarrow -\infty$ , достаточно давно, чтобы определить его энергию  $E_i$  с хорошей точностью. Состояние  $|i\rangle \equiv |i; -\infty\rangle$ , как правило, волновой пакет, который удовлетворяет уравнению Шрёдингера с гамильтонианом  $\hat{H}_0$  *невзаимодействующих* частиц. Будучи так приготовленным, волновой пакет движется к *области взаимодействия* с мишенью (мы предполагаем *конечный* радиус взаимодействия). Взаимодействие описывается динамическим уравнением с *полным* гамильтонианом  $\hat{H}$  системы «снаряд + мишень». Состояние  $|i\rangle$  не является стационарным состоянием  $\hat{H}$  и может испытывать переходы как в снаряде, так и в мишени. Различные возможные конечные состояния соответствуют различным *каналам* процесса. Развитие во времени управляется *оператором эволюции*  $\hat{U}(t, t_0)$ , который преобразует волновую функцию, заданную в момент времени  $t_0$ , в волновую функцию в момент времени  $t$ .

В нашем случае состояние  $|i; -\infty\rangle$  порождает

$$|i; t\rangle = \hat{U}(t, -\infty)|i; -\infty\rangle. \quad (1.15)$$

Покидая область взаимодействия, состояние (1.15) несет продукты процесса рассеяния (конечные свободные частицы), которые регистрируются детекторами в отдаленном будущем,  $t \rightarrow \infty$ . Соответствующий оператор полной эволюции называется *матрицей рассеяния*, или просто  $S$ -матрицей

$$\hat{S} = \hat{U}(+\infty, -\infty). \quad (1.16)$$

Аналогичная конструкция обсуждалась для одномерного движения в задаче 9.4, т. 1. Возможные конечные состояния  $|f\rangle$  опять регулируются гамильтонианом  $\hat{H}_0$  и могут быть представлены в виде суперпозиции стационарных состояний  $\hat{H}_0$  с энергией  $E_f$ . Амплитуда вероятности нахождения некоторого конечного собственного состояния  $|f\rangle$  в суперпозиции, появившейся после взаимодействия, есть, в соответствии с квантовыми правилами, проекция эволюционирующего состояния  $|i; +\infty\rangle$  на состояние  $|f\rangle$

$$\langle f|i; +\infty\rangle = \langle f|\hat{S}|i; -\infty\rangle \equiv \langle f|\hat{S}|i\rangle \equiv S_{fi}. \quad (1.17)$$

Поэтому матричные элементы  $S$ -матрицы на самом деле есть амплитуды наблюдаемых процессов, так что вероятность перехода  $i \rightarrow f$  равна

$$W_{fi} = |S_{fi}|^2. \quad (1.18)$$

Поскольку динамика (1.15) соответствует невозмущенной квантовой эволюции, оператор  $\hat{U}(t, t_0)$  для любых  $t$  и  $t_0$  является *унитарным*. В частности,  $S$ -матрица также является унитарной

$$\hat{S}\hat{S}^\dagger = \hat{S}^\dagger\hat{S} = 1. \quad (1.19)$$

Унитарность необходима для того, чтобы гарантировать учёт всех физических каналов процесса. Вставляя произвольный полный набор промежуточных состояний  $|n\rangle$  в матричный элемент  $\langle f|\dots|i\rangle$  уравнения (1.19), получаем

$$\sum_n (S^\dagger)_{fn} S_{ni} = \sum_n S_{nf}^* S_{ni} = \delta_{fi}, \quad (1.20)$$

или для  $f = i$

$$\sum_n |S_{ni}|^2 = \sum_n W_{ni} = 1, \quad (1.21)$$

что явно выражает *сохранение вероятности*.

Будучи определяемой лежащей в основе динамикой,  $S$ -матрица в некотором смысле величина более фундаментального характера, чем гамиль-

тониан.  $S$ -матрица связывает наблюдаемые состояния и имеет смысл и в теориях, которые не используют гамильтонов формализм. Единственным необходимым условием является возможность определения *асимптотических состояний* невзаимодействующих частиц.

#### 1.4. Вероятность перехода в единицу времени

$S$ -матрица знает все законы сохранения. Её матричные элементы как амплитуды реальных физических процессов исчезают, если состояние  $|f\rangle$  имеет значение интеграла движения, которое отличается от значения такого же интеграла в состоянии  $|i\rangle$ . Другими словами,  $S$ -матрица *диагональна* в квантовых числах коммутирующих сохраняющихся операторов. Здесь мы предполагаем, что и  $\hat{H}_0$ , и полный  $\hat{H}$  имеют общие законы сохранения.

С учетом сохранения энергии, отделяя возможный процесс вообще без рассеяния, запишем  $S$ -матрицу через *матрицу перехода*  $\hat{T}$ , взятую на энергетической поверхности

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{fi}. \quad (1.22)$$

Во втором члене введена  $\delta$ -функция, которая учитывает сохранение энергии в непрерывном спектре, описывающем асимптотические состояния. Теперь мы должны понять правильный способ вычисления её квадрата, который появляется в вероятности переходов (1.18)

$$W_{fi} = |2\pi T_{fi} \delta(E_f - E_i)|^2, \quad f \neq i. \quad (1.23)$$

Этот вопрос уже рассматривался в теории возмущений в разд. II.11.1.

Точное сохранение энергии соответствует бесконечной длительности процесса. Резкая  $\delta$ -функция возникает после предельного перехода

$$2\pi \hbar \delta(E_f - E_i) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t/2}^{+t/2} dt' e^{(i/\hbar)(E_f - E_i)t'}. \quad (1.24)$$

Если выразить одну  $\delta$ -функцию в (1.23) как интеграл (1.24), наличие второй  $\delta$ -функции позволяет положить  $E_f = E_i$  во всех членах, включая интеграл, который сводится тогда к длительности процесса  $t$ . Таким образом, процессы с достаточно точным сохранением энергии при  $t \rightarrow \infty$  (легко оценить, что почти все реальные эксперименты удовлетворяют этому условию) имеют полную вероятность (1.23), пропорциональную времени.

Тогда мы получаем *вероятность перехода в единицу времени*

$$\dot{w}_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W_{fi}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (1.25)$$

Можно показать, что стационарное и зависящее от времени описания в теории рассеяния эквивалентны [2]. Существуют математические тонкости, связанные с необходимостью рассматривать волновые пакеты вместо идеализированных плоских волн. Мы не будем обсуждать здесь такие вопросы, почти всегда можно использовать плоские волны в качестве полного базиса для разложения реальных волновых пакетов непрерывного спектра.

Основное уравнение (1.25) называется *золотым правилом* в связи с его особой важностью, хотя первоначальное *золотое правило Ферми* (разд. II.11.1) было написано в подобной форме только для случая, когда матрица перехода  $T_{fi}$  определяется в *теории возмущений*. Покажем теперь, как этот пертурбативный подход следует из общей формулировки.

## 1.5. Борновское приближение

Согласно идеологии предыдущего раздела, мы разделяем полный гамильтониан  $H$  на части, соответствующие свободному движению невзаимодействующих частиц  $\hat{H}_0$ , и взаимодействие  $\hat{H}'$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \quad (1.26)$$

Обе части предполагаются не зависящими от времени, хотя мы можем рассматривать рассеяние как процесс, происходящий во времени. Невозмущённый гамильтониан  $\hat{H}_0$  формирует асимптотические стационарные состояния  $|n, t\rangle$  с определёнными энергиями  $E_n$ , конечно с экспериментальными неопределённостями  $\delta E$ . В пределе малой неопределённости временная эволюция тривиальна,

$$|n; t\rangle = e^{-(i/\hbar)E_n t} |n\rangle, \quad (1.27)$$

где вектор состояния  $|n\rangle$  не зависит от времени. Взаимодействие  $\hat{H}'$  несет ответственность за переходы между невозмущёнными состояниями (1.27). Если вероятности переходов малы и всё рассеяние можно считать слабым возмущением, мы можем сделать соответствующие упрощения, используя разложение в ряд Тейлора по отношению к эффектам взаимодействия.

Полное уравнение Шрёдингера со взаимодействием есть

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}') |\Psi(t)\rangle. \quad (1.28)$$

Будем решать это уравнение переходом к *представлению взаимодействия*, выделяя явную временную зависимость (1.27), порождённую невозмущённым гамильтонианом; оставшаяся часть в присутствии возмущения все еще зависит от времени:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t} |\Phi(t)\rangle. \quad (1.29)$$

В отсутствие возмущения  $|\Phi\rangle$  была бы не зависящей от времени волновой функцией свободного движения, аналогично  $|n\rangle$  в уравнении (1.27). В бесконечном прошлом мы стартуем с начального состояния  $|i\rangle$  свободного движения, так что граничное условие к уравнению (1.29) есть

$$\underline{t \rightarrow -\infty} : |\Phi(t)\rangle \rightarrow |\Phi(-\infty)\rangle = |i\rangle. \quad (1.30)$$

$|\Phi(t)\rangle$  называется волновой функцией в представлении взаимодействия.

Подставляя (1.29) в (1.28), мы видим, что вся временная зависимость в  $|\Phi(t)\rangle$  обязана взаимодействию  $\hat{H}'$ ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = \hat{H}'_{\text{int}}(t) |\Phi(t)\rangle, \quad (1.31)$$

где гамильтониан  $\hat{H}'$  преобразован в представление взаимодействия согласно общим правилам преобразования операторов при унитарном преобразовании состояний (1.29),

$$\hat{H}'_{\text{int}}(t) = e^{(i/\hbar)\hat{H}_0 t} \hat{H}' e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t}. \quad (1.32)$$

Теперь возмущение явно зависит от времени.

Новое уравнение (1.31) позволяет определить оператор эволюции  $\hat{U}(t, t_0)$ , где в нашем случае  $t_0 \rightarrow -\infty$ . Имея в виду начальное условие (1.30), ищем решение уравнения (1.31) в виде

$$|\Phi(t)\rangle = \hat{U}(t, -\infty) |i\rangle. \quad (1.33)$$

Как следует из (1.30) и (1.31), оператор эволюции должен удовлетворять операторному уравнению движения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}'_{\text{int}}(t) \hat{U}(t, t_0) \quad (1.34)$$

вместе с очевидным начальным условием, справедливым для любого  $t_0$ ,

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1. \quad (1.35)$$

Уравнения (1.34) и (1.35) можно скомбинировать в интегральное уравнение

$$\hat{U}(t, -\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \hat{H}_{\text{int}}(t') \hat{U}(t', -\infty). \quad (1.36)$$

Уравнение (1.36) эквивалентно первоначальному уравнению Шрёдингера (1.28) плюс начальное условие. Но его удобнее использовать для решения итерациями, которые соответствуют упоминавшемуся выше тейлоровскому разложению. Здесь мы рассмотрим низший порядок, так называемое первое борновское приближение.

Предполагая, что эффекты взаимодействия являются в некотором смысле слабыми (позднее мы уточним это утверждение), мы можем заменить оператор  $\hat{U}$  в подынтегральном выражении на его невозмущённое значение 1. Переходя затем к пределу  $t \rightarrow +\infty$ , мы получаем явное выражение для  $S$ -матрицы (1.16) в первом порядке

$$\hat{S} \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \hat{H}_{\text{int}}(t'). \quad (1.37)$$

Беря матричный элемент  $\langle f | \hat{S} | i \rangle$   $S$ -матрицы (1.37) между невозмущёнными состояниями,  $f \neq i$ , которые являются собственными состояниями  $\hat{H}_0$  с собственными значениями соответственно  $E_f$  и  $E_i$  и используя выражение (1.32) для  $\hat{H}'_{\text{int}}(t)$ , получаем

$$S_{fi} = -\frac{i}{\hbar} H'_{fi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{(i/\hbar)(E_f - E_i)t} = -2\pi i H'_{fi} \delta(E_f - E_i). \quad (1.38)$$

Сохранение энергии возникает, как и в (1.24), в результате предельного перехода к бесконечной длительности процесса. Сравнение с точным выражением (1.22) показывает, что амплитуда перехода  $T_{fi}$  в первом борновском приближении даётся просто недиагональным матричным элементом гамильтониана взаимодействия  $H'$ . Наконец, золотое правило (1.25) даёт вероятность перехода в единицу времени в борновском приближении,

$$\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (1.39)$$

которое совпадает с золотым правилом (II.11.6). С правильной *плотностью конечных состояний* (разд. II.11.3) мы получаем дифференциальное сечение, совпадающее с (II.12.6).

В первом борновском приближении возмущение действует только один раз (*однократный процесс*). Амплитуда (1.37) интегрируется по всем возможным временам взаимодействия, и вероятность (1.18) полностью учитывает интерференцию взаимодействий, которые происходят в разные моменты времени. Следующие итерации уравнения (1.36) отвечают вкладам *многократного рассеяния*. Можно найти формальное точное решение полного интегрального уравнения (1.36), но в большинстве случаев оно бесполезно. Простые задачи рассеяния одной частицы на внешнем потенциале могут быть решены численно, в то время как многочастичные задачи в большинстве случаев требуют дополнительных физических приближений. Часто уже борновское приближение даёт разумную качественную и даже количественную картину.

## 1.6. Уравнение непрерывности

Элементы  $S$ -матрицы и сечение могут быть рассчитаны в важном случае *потенциального рассеяния*, описываемого уравнением Шрёдингера с фиксированной энергией  $E = \varepsilon$

$$\left\{ \nabla^2 + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}. \quad (1.40)$$

Здесь мишень моделируется фиксированным потенциалом  $U(\mathbf{r})$  без внутренних степеней свободы. Такой подход позволяет разработать точные методы и найти соответствующие приближения для конкретных ситуаций. Фактически некоторые результаты будут иметь гораздо более широкую область применимости к более сложным случаям, в том числе к неупругим процессам.

На этой стадии мы будем интересоваться только *упругим* каналом, детектируя рассеянную начальную частицу. Потенциал предполагается имеющим конечный радиус действия  $R$ , будучи в остальном достаточно произвольным (необязательно изотропным). Присутствие неупругих процессов, которые выводят частицу из упругого канала, иногда может быть учтено феноменологически введением *комплексного* эффективного потенциала  $U(\mathbf{r})$ .

Уравнение Шрёдингера с действительным потенциалом позволяет определить *сохраняющийся ток*, см. (I.7.55),

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[ \psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi \right]. \quad (1.41)$$

Ток удовлетворяет *уравнению непрерывности*, см. (I.2.11), которое для стационарного состояния с определённой энергией превращается в

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \quad (1.42)$$

Эффективный *комплексный* потенциал нарушает эрмитовость гамильтониана, сохранение вероятности и инвариантность относительно отражения времени. Даже в стационарном состоянии (постоянный падающий поток) частицы «исчезают», уходя в неупругие каналы. Повторяя стандартные вычисления, мы находим

$$\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{2}{\hbar} |\psi(\mathbf{r})|^2 \operatorname{Im} U(\mathbf{r}). \quad (1.43)$$

Мнимая часть потенциала,  $\operatorname{Im} U$ , которую мы также предполагаем короткодействующей, должна быть отрицательной, чтобы описывать исчезновение частиц; противоположный знак отвечает рождению частиц.

В отсутствие неупругих процессов поток  $\oint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A}$  через бесконечно удалённую замкнутую поверхность равен нулю. В присутствии неупругих процессов это уже не так, поток становится отрицательным. Его отношение к плотности падающего потока  $j_i$  даёт сечение *поглощения* (полное неупругое сечение или сечение реакции)

$$\sigma_{\text{inel}} = -\frac{1}{j_i} \oint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A} = -\frac{1}{j_i} \int_V d^3r \operatorname{div} \mathbf{j}. \quad (1.44)$$

Полное сечение есть сумма упругой и неупругой части

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{inel}}. \quad (1.45)$$

Обсудим теперь в деталях определение упругого сечения.

## 1.7. Упругое рассеяние

Удалённый источник формирует начальный поток частиц, движущихся вдоль оси  $\mathbf{k}$  с энергией  $\varepsilon$ . Поток описывается плоской волной

$$\psi_i(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}, \quad (1.46)$$

где мы пользуемся нормировкой на единичную плотность. Нормировка с помощью большого объёма, которая может быть удобной в борновском приближении, записывается как

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}. \quad (1.47)$$

Детектор, расположенный далеко, на расстоянии  $r \gg R$ , где  $R$  есть характерный размер области взаимодействия, регистрирует упруго рассеянные частицы в телесном угле  $do$  в направлении  $\mathbf{r} = r\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ . После взаимодействия частицы движутся свободно, и в упругом рассеянии они имеют волновой вектор  $\mathbf{k}'$  той же величины, что и  $\mathbf{k}$ , но направленный вдоль  $\mathbf{r}$ :

$$\mathbf{k}' = k\mathbf{n} = k \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (1.48)$$

Неупругие каналы в этом случае не регистрируются, но учитываются глобально в терминах поглощения (1.44).

В асимптотической области больших  $r$  волновая функция, искажённая рассеивателем, всё ещё является суперпозицией решений уравнения Шрёдингера для свободного движения. Она может отличаться от начальной волны только на *расходящуюся сферическую волну*  $\sim \exp(ikr)/r$ , где знаменатель  $r$  возникает из-за распределения тока по большой поверхности, как это обсуждалось в гл. II.2. Амплитуда расходящейся волны может зависеть от угла рассеяния  $\theta$  между векторами  $\mathbf{k}'$  и  $\mathbf{k}$ . Таким образом, *асимптотический вид* волновой функции может быть записан как

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (1.49)$$

где  $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  есть *амплитуда рассеяния*, имеющая размерность длины. Граничное условие (1.49) иногда называют *условием излучения Зоммерфельда*.

Для начальной волны с нормировкой (1.46) ток, обсуждавшийся в разд. I.7.6, равен  $\mathbf{j}_i = \hbar\mathbf{k}/m = \mathbf{v}$ , как это и должно быть для  $\mathbf{j} = \rho\mathbf{v}$  с единичной плотностью  $\rho$ . Уходящий поток определяется рассеянной волной в (1.49). Радиальная компонента тока (1.41) равна

$$j_{\text{scatt}} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[ f^* \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( f \frac{e^{ikr}}{r} \right) \right] = \frac{v}{r^2} |f|^2; \quad (1.50)$$

угловые компоненты тока убывают быстрее, чем  $\sim 1/r^2$ . В данный момент мы не интересуемся интерференцией между падающей и рассеянной волна-

ми. Интерференцию возможно наблюдать только при положении детектора почти точно в направлении  $\mathbf{k}$ , внутри исчезающе малого угла  $\theta_d \simeq \lambda/d$ , где  $d$  есть ширина коллиматора, формирующего пучок;  $\theta_d$  — это дифракционный угол волны, дифрагировавшей на границах коллиматора. Для  $\theta > \theta_d$  можно пренебречь интерференционной частью асимптотического тока. Интерференция в области взаимодействия,  $r < R$ , полностью учтена в амплитуде рассеяния  $f$ .

Выражение для сечения немедленно следует из тех же аргументов, что и при выводе (II.12.5). Детектор с площадью  $d\mathcal{A} = r^2 do$  на расстоянии  $r$  будет регистрировать

$$dN = j_{\text{scatt}} d\mathcal{A} = j_{\text{scatt}} r^2 do = v|f|^2 do \quad (1.51)$$

частиц в секунду. Отношение скорости счёта к плотности падающего потока определяет дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{do} = \frac{dN}{j_i do} = |f|^2. \quad (1.52)$$

Этот результат не зависит от нормировки волновой функции.

## 1.8. Унитарность и оптическая теорема

Унитарность  $S$ -матрицы (1.19), непосредственно связанная с сохранением тока, налагает важные ограничения на амплитуду рассеяния. Рассмотрим более внимательно асимптотику волновой функции (1.49).

Плоская волна в асимптотике выглядит как суперпозиция (II.2.109) уходящей волны в направлении  $\mathbf{k}$  и падающей волны в направлении  $-\mathbf{k}$ ,

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \approx \frac{2\pi}{ikr} \left[ e^{ikr} \delta(\mathbf{n}_{\mathbf{k}} - \mathbf{n}) - e^{-ikr} \delta(\mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n}) \right]. \quad (1.53)$$

Вычислим опять ток вероятности (1.41), но теперь с учётом интерференционной части. Последняя была несущественна для вычисления сечения, за исключением исчезающе малых углов, но в сохранении вероятностей она играет важную роль. Как и раньше, на больших расстояниях мы должны дифференцировать только экспоненты. Прямое вычисление с волновой функцией (1.49) даёт

$$\mathbf{j} = v \left\{ \mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n} \frac{|f|^2}{r^2} + \frac{\mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n}}{2r} \left( f e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})+ikr} + f^* e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-ikr} \right) \right\}. \quad (1.54)$$

В уравнениях (1.53) и (1.54), как и ранее,  $\mathbf{n}_k$  и  $\mathbf{n}$  — это единичные вектора вдоль  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{r}$  (или  $\mathbf{k}'$  соответственно, см. уравнение (1.48)).

В (1.54) мы имеем падающий и рассеянный потоки и их интерференцию. Подставляя в интерференционный член асимптотики (1.53) плоских волн и замечая, что из-за вектора  $\mathbf{n}_k + \mathbf{n}$  члены с  $\delta(\mathbf{n}_k + \mathbf{n})$  не дают вклада (напоминаем, что  $x\delta(x) = 0$ ), мы приходим к току следующего вида:

$$\mathbf{j} = v \left\{ \mathbf{n}_k + \mathbf{n} \frac{|f|^2}{r^2} - \mathbf{n} \frac{4\pi}{kr^2} \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}_k) \operatorname{Im} f(0) \right\}. \quad (1.55)$$

Как уже упоминалось, интерференция возможна только в направлении вперёд,  $\mathbf{n} = \mathbf{n}_k$ ; соответствующая упругая амплитуда есть  $f(0) \equiv f(\mathbf{k}, \mathbf{k})$ .

Окружим область взаимодействия большой сферой ( $r \rightarrow \infty$ ) и вычислим полный поток через эту сферу. Начальная волна проходит сквозь сферу без изменений, так что полный поток от неё равен нулю. Рассеянный поток и интерференционный член дают

$$\oint d\vec{A} \cdot \mathbf{j} = v \int d\Omega r^2 \frac{|f|^2}{r^2} - v \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (1.56)$$

Интеграл в правой части уравнения (1.56) есть упругое сечение, проинтегрированное по всем углам:

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d\Omega |f|^2. \quad (1.57)$$

Интеграл по бесконечно большой сфере в левой части (1.56) может быть отличен от нуля только при наличии неупругих процессов, когда ток «утекает» из упругого канала, демонстрируя кажущееся нарушение уравнения непрерывности. Этот интеграл определяет сечение поглощения (1.44).

Возвращаясь к уравнению (1.56), мы получаем (сравните уравнения (П.15.45, П.15.93) для рассеяния света) *оптическую теорему*, которая связывает мнимую часть *упругой* амплитуды рассеяния вперёд с *полным* сечением всех процессов, упругих и неупругих:

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{inel}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (1.58)$$

Фактически эта теорема говорит только о сохранении полного числа частиц. Исчезновение частиц из начального пучка возникает из-за интерференции падающего потока с потоком, рассеянным в направлении вперёд. Эти частицы вновь появляются в упругом и неупругих каналах.

**Задача 1.2**

Показать, что для чисто упругого рассеяния (нет поглощения) оптическая теорема (1.58) есть частный случай с  $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}}$  *упругого условия унитарности*:

$$\frac{1}{2i} \left[ f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right] = \frac{k}{4\pi} \int d\mathbf{n}'' f^*(\mathbf{k}'', \mathbf{k}') f(\mathbf{k}'', \mathbf{k}), \quad (1.59)$$

где интегрирование идёт по углам вектора  $\mathbf{k}'' = k\mathbf{n}''$ , имеющего ту же величину, что и  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ .

**Решение.**

Вывод делается непосредственно из уравнения Шрёдингера: запишите уравнение Шрёдингера для волновых функций  $\psi_{\mathbf{k}}$  и  $\psi_{\mathbf{k}'}$  с волновыми векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  равной длины; умножьте уравнения на  $\psi_{\mathbf{k}'}^*$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$  соответственно, вычтите одно из другого и проинтегрируйте по большому объёму, используя асимптотики (1.49) и разложение плоской волны (1.53). При  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  уравнение (1.59) даёт снова оптическую теорему (1.58) с  $\sigma_{\text{inel}} = 0$ .

Рассмотрим  $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  как матричный элемент  $\langle \mathbf{k}' | \hat{f} | \mathbf{k} \rangle$  оператора  $\hat{f}$ , определённого на энергетической поверхности  $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$ , который преобразует начальную падающую волну в упруго рассеянную согласно правилу

$$\hat{f}\psi_{\mathbf{k}} = \int \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi} \langle \mathbf{k}' | \hat{f} | \mathbf{k} \rangle \psi_{\mathbf{k}'}. \quad (1.60)$$

Тогда условие упругой унитарности (1.59) можно записать в операторном виде

$$\hat{f} - \hat{f}^\dagger = 2ik\hat{f}\hat{f}. \quad (1.61)$$

По физическому смыслу, амплитуда рассеяния  $f$  на энергетической поверхности эквивалентна общему оператору рассеяния  $T$  в уравнении (1.22). Их нормировка немного различна,  $T \leftrightarrow -2kf$ . Вводя  $S$ -матрицу как оператор на энергетической поверхности,

$$\hat{S} = 1 + 2ik\hat{f}, \quad (1.62)$$

мы видим, что уравнение (1.61) эквивалентно условию унитарности (1.19).

### 1.9. Функция Грина

По-видимому, наиболее общим подходом в теории рассеяния является метод *функций Грина*. Будучи в принципе точным, он позволяет делать множество приближений в зависимости от конкретных физических ситуаций. Кроме того, он непосредственно обобщается на непотенциальные задачи.

Нам нужно решить уравнение Шрёдингера с граничным условием излучения (1.49) в асимптотической области. Будем искать решение в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + \psi'(\mathbf{r}), \quad (1.63)$$

где рассеянная волна  $\psi'(\mathbf{r})$  ведёт себя на асимптотически больших расстояниях как  $f \exp(ikr)/r$ . Плоская волна удовлетворяет уравнению

$$(\nabla^2 + k^2) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} = 0, \quad (1.64)$$

так что второй член в (1.63) должен быть решением *неоднородного* уравнения

$$(\nabla^2 + k^2)\psi'(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (1.65)$$

с полной функцией  $\psi$ , уравнение (1.63), в правой части.

Функция Грина  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  определяется как решение свободного волнового уравнения (по отношению к координате  $\mathbf{r}$ ), индуцированное единичным источником, расположенным в точке  $\mathbf{r}'$ ,

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.66)$$

Это уравнение не определяет однозначно функцию Грина. Действительно, всегда можно получить другое решение (1.66), прибавляя решение *однородного* уравнения (1.64) с произвольным коэффициентом. Функция Грина должна быть доопределена граничным условием. В нашей задаче мы потребуем, чтобы в асимптотике была *расходящаяся волна*

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto \frac{e^{ikr}}{r}, \quad r \gg r'. \quad (1.67)$$

Тогда принцип суперпозиции даёт формальное решение уравнения Шрёдингера (1.65) в виде

$$\psi'(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (1.68)$$

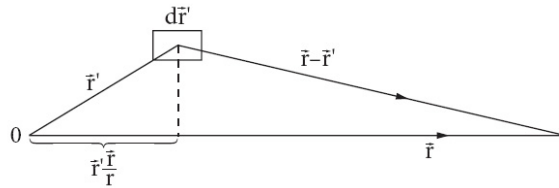


Рис. 1.3. Геометрический смысл разложения (1.71)

Конечно, это всё ещё интегральное уравнение, *уравнение Липпмана—Швингера*. Под интегралом ещё стоит неизвестная функция  $\psi$ . Уравнение (1.68) удобно тем, что оно объединяет первоначальное уравнение Шрёдингера с граничным условием для  $\psi'$ , которое выполняется благодаря тому, что функция Грина в (1.68) удовлетворяет уравнению (1.67).

Вспоминая решение уравнения Пуассона для точечного заряда,

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (1.69)$$

легко видеть, что решение уравнения (1.66) с желаемой асимптотикой (1.67) есть

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (1.70)$$

Оператор  $\nabla^2 + k^2$ , действующий на (1.70), даёт ноль везде за исключением сингулярной точки  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ , где он даёт  $\delta$ -функцию, как в (1.69). Граничное условие (1.67) также выполняется.

При  $r \gg r'$  мы имеем (рис. 1.3)

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2r(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}) + r'^2} \approx r - (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (1.71)$$

Поэтому показатель экспоненты в (1.70) приближённо равен  $kr - k(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}') = kr - (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')$  с обычным определением (1.48) вектора  $\mathbf{k}'$ . Для асимптотического поведения мы получаем

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (1.72)$$

что мы и хотели: расходящуюся сферическую волну (1.67), умноженную на амплитуду, которая зависит только от ориентации рассеянного волнового вектора  $\mathbf{k}'$  по отношению к вектору  $\mathbf{r}'$  — некоторой точки в области взаимо-

действия; эта область в подынтегральном выражении (1.68) определяется потенциалом  $U(\mathbf{r}')$ .

Таким образом, мы пришли к интегральному уравнению, которое следует из (1.63, 1.68) и (1.70),

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'). \quad (1.73)$$

Так же, как в обсуждении формфакторов в разд. II.12.3, это уравнение выражает *принцип суперпозиции*. Волновая функция в точке  $\mathbf{r}$  формируется первичной плоской волной, приходящей сюда без всякого взаимодействия, и вторичными сферическими волнами, излучёнными из точек  $\mathbf{r}'$ , где существует ненулевой потенциал. Вклад каждой внутренней точки  $\mathbf{r}'$  пропорционален потенциалу  $U(\mathbf{r}')$  и *полной амплитуде*  $\psi(\mathbf{r}')$  волновой функции в этой точке. Это уравнение *самосогласованно*, в отличие от борновского приближения.

Беря в уравнении (1.73) точку  $\mathbf{r}$  далеко от области взаимодействия,  $r \gg R$ , и используя (1.72), мы получаем точное выражение для амплитуды рассеяния как коэффициент (1.49) перед расходящейся сферической волной  $e^{ikr}/r$ ,

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}')} U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'), \quad (1.74)$$

где зависимость от  $\mathbf{k}$  скрыта в функции  $\psi$  в подынтегральном выражении.

### Задача 1.3

- Для потенциала, который падает на больших расстояниях как  $U(r) \propto r^{-s}$ , найти, какие значения  $s$  допускают асимптотическое решение в виде (1.74).
- Для потенциала, который становится пренебрежимо малым на расстояниях  $r \sim R$ , найти, на каких расстояниях становится справедливым асимптотическое представление (1.49).

### Решение.

- Выражение для амплитуды рассеяния получено в предположении, что асимптотическую волновую функцию можно разложить на падающую и рассеянную волны. Уравнение (1.74) должно обеспечивать сходящийся результат для обоих членов разложения (1.49) функции  $\psi_{\mathbf{k}}$ . Первый член даёт борновское приближение, которое содержит интеграл

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})} \frac{1}{r^s} = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr \frac{\sin(qr)}{r^{s-1}}. \quad (1.75)$$

Интеграл сходится при  $s > 1$ , в противном случае потенциал падает слишком медленно и нет области, где падающая волна не была бы искажена; в частности, кулоновский случай не допускает строгого разложения волновой функции, хотя формально вычисленное резерфордское сечение правильно (но фаза амплитуды рассеяния потеряна).

- b) С правильным выбором функции Грина (1.72) интегральное уравнение для рассеянной волновой функции принимает вид (1.73). В асимптотической области  $r \gg R$ , где  $R$  — радиус действия потенциала, всегда можно пренебречь  $r'$  в знаменателе. Но в числителе функции Грина важно понимать, какую ошибку вносит такое приближение в фазу экспоненты. Аккуратное разложение, включая члены второго порядка, даёт

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') + r'^2} \approx r - \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')}{r} + \frac{1}{2r} \left[ r'^2 - \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')^2}{r^2} \right]. \quad (1.76)$$

Чтобы можно было пренебречь членами второго порядка в показателе экспоненты, недостаточно иметь  $r \gg R$ ; нужно, чтобы  $kR^2/r \ll 1$ . В случае быстрых частиц  $kR \gg 1$ , мы должны уходить на расстояния  $r \gg kR^2 \sim R(kR) \gg R$ . Только на таких больших расстояниях функция приобретает асимптотический вид. Оптические аналоги этого хорошо известны [3, §61].

## 1.10. Борновский ряд

Простейшей попыткой решения интегрального уравнения (1.73) является решение *итерациями*. Подставим полное выражение (1.73) в последний член. Это даёт

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')} \\ &+ \left( -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^3r' d^3r'' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi(\mathbf{r}''). \end{aligned} \quad (1.77)$$

Эта процедура может быть продолжена, давая бесконечный *борновский ряд* (в теории интегральных уравнений он называется *рядом Неймана*).

Мы начинаем с плоской волны (нет рассеяния). Следующий член содержит эффект *однократного* рассеяния падающей волны в точке  $\mathbf{r}'$  и последующего свободного распространения до точки наблюдения  $\mathbf{r}$ . Интеграл по всем точкам взаимодействия  $\mathbf{r}'$  учитывает квантовую интерференцию всех возможных амплитуд. Свободное движение  $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$  от «источника» в

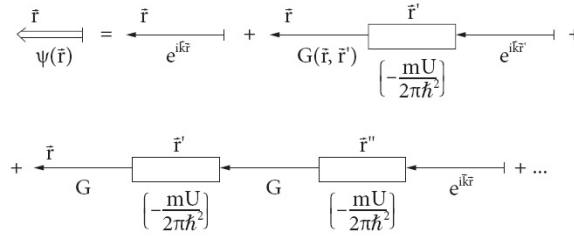


Рис. 1.4. Борновский ряд в диаграммах

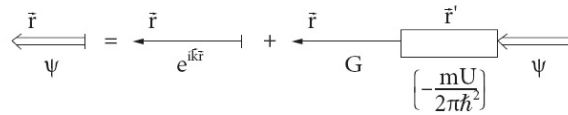


Рис. 1.5. Интегральное уравнение для волновой функции рассеяния

точке  $\mathbf{r}'$  описывается функцией Грина  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , которая по этой причине называется *пропагатором* свободных частиц. Третий член борновского ряда описывает *двукратное* рассеяние с распространением между рассеяниями и после них, и т.д. Структура всего ряда регулярна и соответствует картине *многократного* рассеяния. Будучи просто аналитическим выражением принципа суперпозиции, этот ряд близко связан с *формулировкой Фейнмана квантовой механики* как функционального интеграла по всем возможным путям, см. разд. I.7.11.

Борновский ряд может быть изображён *диаграммами* (рис. 1.4), которые позволяют немедленно написать аналитическое выражение для члена произвольно высокого порядка. Поскольку графическое выражение справа от первой функции Грина  $G$  и первой вершины взаимодействия  $U$  является тем же самым бесконечным рядом, мы можем записать символическое уравнение (рис. 1.5), которое есть не что иное, как первоначальное уравнение (1.73).

Точное аналитическое решение интегрального уравнения (1.73) или суммирование всего ряда обычно невозможно. Более того, даже численное решение встречает серьёзные трудности, если потенциал не имеет симметрии и переменные не разделяются. Однако сама структура ряда открывает пути для различных приближённых методов.

Простейшее приближение заключается в обрывании ряда на каком то шаге. Это можно формально обосновать, если потенциал слабый, поскольку каждый следующий шаг даёт дополнительную степень  $U$ . Первое борнов-

ское приближение учитывает только однократные процессы:

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')}. \quad (1.78)$$

Из (1.78) и (1.72) мы находим амплитуду рассеяния в борновском приближении:

$$f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}')} U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')} \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} U_{\mathbf{q}}, \quad (1.79)$$

где мы ввели фурье-компоненту потенциала  $U_{\mathbf{q}}$  для переданного импульса  $\mathbf{q}$ , уравнение (II.12.14).

Дифференциальное сечение в этом приближении

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |U_{\mathbf{q}}|^2 \quad (1.80)$$

совпадает с тем, что было найдено в теории возмущений (упругий предел в уравнении (II.12.12)). В этом порядке вся зависимость от энергии и угла рассеяния проявляется только через передаваемый импульс  $\mathbf{q}$ . Для изотропного потенциала  $U(r)$  интегрирование по углам  $\mathbf{r}'$  в (1.79) (если взять  $\mathbf{q}$  за полярную ось) даёт

$$f_B(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr \frac{\sin(qr)}{qr} r^2 U(r). \quad (1.81)$$

#### Задача 1.4

Для произвольного центрального потенциала  $U(r)$  показать, что если борновское приближение справедливо, произведение  $E\sigma(E)$ , где  $\sigma(E)$  есть полное сечение рассеяния при энергии  $E$ , является монотонно растущей функцией  $E$ .

#### Решение.

Из борновского приближения для сечения

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi \sin\theta d\theta |f(q)|^2, \quad (1.82)$$

преобразованного с помощью подстановки

$$\mu = q^2, \quad d\mu = 2k^2 \sin\theta d\theta, \quad (1.83)$$

как

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{4k^2} d\mu |f|^2 = \frac{\pi \hbar^2}{2mE} \int_0^{8mE/\hbar^2} d\mu |f|^2, \quad (1.84)$$

следует, что  $E\sigma(E)$  есть возрастающая функция энергии.

### 1.11. Применимость борновского приближения

Обрывание борновского ряда может быть обосновано, если отброшенные члены малы по сравнению с удержанными. Каждый следующий член даёт дополнительный интеграл от произведения потенциала и пропагатора. Условие малости  $n$ -го члена по сравнению с  $n - 1$ -м может быть записано как

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')} \right| \ll |e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}| = 1. \quad (1.85)$$

Наиболее опасной областью для нарушения условия (1.85) является область малых  $r$ . Предполагая гладкость потенциала и отсутствие существенных сингулярностей, получаем для  $r = 0$  и *низких энергий*  $kR \ll 1$

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{U(\mathbf{r}')}{r'} \right| \sim 4\pi \frac{mR^2}{4\pi\hbar^2} |\bar{U}| \sim \frac{|\bar{U}|}{\bar{K}} \ll 1, \quad (1.86)$$

где мы ввели среднее значение потенциала  $\bar{U}$ . Это значит, что средняя потенциальная энергия  $\bar{U}$  должна быть мала по сравнению со средней кинетической энергией  $\bar{K} \sim \hbar^2/mR^2$ , обязанной локализации частицы в области взаимодействия, в силу соотношения неопределённостей. Вспомним, что этот параметр определяет *мелкую потенциальную яму*, см. разд. I.3.5.

Применимость борновского приближения улучшается при *высокой энергии*. Оно может быть справедливо в смысле критерия (1.86) даже для сильного взаимодействия. При возрастании энергии волновая функция начинает быстро осциллировать внутри области интегрирования. Как и в обсуждении формфакторов в разд. II.12.3, интеграл, определяющий рассеянную волну в (1.73), становится мал из-за сокращения вкладов от различных частей области интегрирования  $r' < R$ . Для  $r = 0$  имеем из (1.85)

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int d^3r \frac{U(\mathbf{r})}{r} e^{i[kr+(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]} \right| \ll 1. \quad (1.87)$$

Рассматривая для простоты изотропный потенциал  $U(r)$  и выполняя интегрирование по углам, как и в (1.81), получаем

$$\frac{m}{k\hbar^2} \left| \int_0^\infty dr U(r)(e^{2ikr} - 1) \right| \ll 1. \quad (1.88)$$

При низких энергиях,  $e^{2ikr} - 1 \approx 2ikr$ , и мы возвращаемся к оценке (1.86). Но при  $kR \gg 1$  осциллирующий член  $e^{2ikr}$  даёт почти исчезающий вклад (гладкий потенциал не имеет таких высоких фурье-компонент). Тогда условие применимости борновского приближения становится намного слабее:

$$\frac{mR}{k\hbar^2} \bar{U} \sim \frac{\bar{U}}{K} \frac{1}{kR} \ll 1. \quad (1.89)$$

Таким образом, точность борновского приближения возрастает при высоких энергиях (время взаимодействия мало, так что многократные процессы менее вероятны).

Для кулоновского потенциала  $U(r) = Ze^2/r$  нельзя ввести определённый радиус действия сил. Но, используя в (1.89) произвольный радиус  $R$  и оценивая  $\bar{U}$  как  $U(R)$ , мы получаем эффективный критерий слабости кулоновского взаимодействия в терминах *параметра Зоммерфельда*, см. (I.2.66):

$$\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v}. \quad (1.90)$$

Кулоновское взаимодействие может рассматриваться как возмущение, если

$$\frac{mR}{k\hbar^2} \frac{Ze^2}{R} = \frac{mZe^2}{k\hbar^2} = \eta \ll 1. \quad (1.91)$$

### Задача 1.5

Вычислить в борновском приближении сечение рассеяния быстрой частицы на потенциале Юкавы  $U(r) = (g/r) \exp(-\mu r)$ .

#### Решение.

Борновское приближение применимо, если потенциал слабый, условие (1.86), или для быстрых частиц, условие (1.89). Первое условие в этом случае даёт  $gm/\mu\hbar^2 \ll 1$ , что совпадает с условием отсутствия связанных состояний, если потенциал притягивающий, задача I.1.8. Условие для быстрых частиц  $g/\hbar v \ll 1$  похоже на аналогичное условие для кулоновского потенциала (1.91).

Амплитуда рассеяния может быть легко вычислена из (1.81). Дифференциальное сечение монотонно убывает с увеличением передаваемого импульса

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 4 \left( \frac{gm}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(q^2 + \mu^2)^2}. \quad (1.92)$$

Для  $\mu \rightarrow 0$  результат совпадает с резерфордским сечением (П.12.25). Полное сечение получается интегрированием по углам. Оно расходится при  $\mu \rightarrow 0$ :

$$\sigma = 16\pi \left( \frac{gm}{\hbar^2\mu} \right)^2 \frac{1}{4k^2 + \mu^2}. \quad (1.93)$$

При низких энергиях  $kR \ll 1$  рассеяние в борновском приближении изотропно, как это уже обсуждалось в связи с формфакторами. При возрастании энергии в рассеянии появляется пик вперёд, внутри конуса  $\theta \leq 1/kR$ . Качественно такие свойства рассеяния присутствуют и в классической механике, задача 1.1. Но следует отметить, что невозможно в борновском приближении получить точный результат для  $\theta \rightarrow 0$ . Борновская амплитуда  $f(0)$  действительна, что противоречит оптической теореме (1.58). Полное сечение, а следовательно, и  $\text{Im}f(0)$ , являются величинами *второго порядка* по отношению к потенциалу. Такими вкладами мы пренебрегаем в низшем борновском приближении.

### 1.12. Рассеяние при высоких энергиях

Борновское приближение может быть подправлено так, чтобы выполнялась оптическая теорема и расширилась область применимости. Единственное условие применимости этого *приближения прицельного параметра*, или *приближения эйконала*, заключается в том, что энергия должна быть велика по сравнению с потенциалом  $\bar{U}/E \ll 1$ . Борновский параметр (1.89)  $(\bar{U}/K)(1/kR) \sim (\bar{U}/E)(kR)$  может быть при этом большим.

При высоких энергиях много парциальных волн дают вклад в сечение рассеяния. Их интерференция приводит к выделению области вблизи классической траектории с прицельным параметром  $b$ , который определяется средним орбитальным моментом интерферирующих волн  $b \sim \ell/k$ . Траектория близка к прямой линии, и ось пучка  $z$  определяет направление, в котором волновая функция осциллирует наиболее быстро. Волновую функцию можно записать как

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{ikz} C(\mathbf{r}), \quad (1.94)$$

где амплитудная функция  $C(\mathbf{r})$  меняется медленнее, чем экспонента  $e^{ikz}$  с большим  $k$ .

При подстановке волновой функции (1.94) в уравнение Шрёдингера мы можем пренебречь поперечными ( $x$  и  $y$ ) производными, которые малы по сравнению с главным членом  $\sim 2(\nabla e^{ikz}) \cdot (\nabla C)$ , содержащим градиент вдоль траектории. В этом приближении для медленно меняющейся амплитуды мы получаем

$$2ik \frac{\partial C(\mathbf{r})}{\partial z} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r})C(\mathbf{r}). \quad (1.95)$$

Пренебрегая поперечными производными, мы не учитываем дифракционное уширение пучка, которое будет существенным на очень больших расстояниях, как в *дифракции Фраунгофера* от удалённого источника света [3, §61]. Наша цель состоит в том, чтобы найти амплитуду рассеяния  $f$ , которая, согласно точному выражению (1.74), определяется волновой функцией *в области взаимодействия*.

Решение уравнения (1.95) есть

$$C(\mathbf{r}) = e^{-(i/\hbar v) \int_{-\infty}^z dz U(\mathbf{r})}. \quad (1.96)$$

Интеграл в (1.96) определяет *эйконал*, изменение фазы вдоль прямой траектории, параллельной оси  $z$ . Волновая функция в (1.96) взята в точке  $\mathbf{r} = \sqrt{z^2 + \mathbf{b}^2}$ , где  $\mathbf{b}$  — двумерный поперечный вектор. Здесь мы не предполагаем, что потенциальная фаза в (1.96) мала.

В классическом пределе фаза  $\varphi$  волновой функции связана с *классическим действием*  $A = \int p dq$  вдоль траектории, измеренным в единицах  $\hbar$ ,  $\varphi \leftrightarrow A/\hbar$ . Изменение действия из-за присутствия рассеивающего потенциала равно

$$\frac{\Delta A}{\hbar} = \int dz \left( \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U} - k \right). \quad (1.97)$$

При высоких энергиях  $E \gg U$  мы можем сделать разложение, выделив член, линейный по потенциалу:

$$\frac{\Delta A}{\hbar} \approx -\frac{1}{\hbar v} \int dz U. \quad (1.98)$$

Это и есть сдвиг фазы в приближении эйконала (1.96).

Теперь мы используем эйкональное выражение

$$U\psi = i\hbar v e^{ikz} \frac{\partial C}{\partial z}, \quad (1.99)$$

которое следует из уравнения (1.95), в определении (1.74) амплитуды рассеяния

$$f = \frac{k}{2i\pi} \int d^3r \frac{\partial C}{\partial z} e^{ikz - i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}. \quad (1.100)$$

Показатель экспоненты равен

$$kz - (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) = (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r} = -(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.101)$$

со стандартным определением передаваемого импульса  $\mathbf{q}$ . Поскольку траектория близка к прямой линии и угол рассеяния мал, то  $\mathbf{q}$  перпендикулярен к  $\mathbf{k}$ . Поэтому  $(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \approx (\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})$ . Это позволяет проинтегрировать по  $z$  в (1.100):

$$f = \frac{k}{2i\pi} \int dz \frac{\partial C}{\partial z} \int d^2b e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})}. \quad (1.102)$$

Интеграл по  $z$  в (1.102) даёт разность  $C(z = \infty)$  и  $C(z = -\infty) = 1$ . Полный фазовый интеграл (1.96) определяет квазиклассическое выражение для  $S$ -матрицы при заданной величине прицельного параметра  $\mathbf{b}$ :

$$S(\mathbf{b}) = e^{2i\delta(\mathbf{b})}. \quad (1.103)$$

Это соответствует *фазе рассеяния*

$$\delta(\mathbf{b}) = -\frac{1}{2\hbar v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz U(\mathbf{b}, z) \quad (1.104)$$

в согласии с полуклассической интерпретацией (1.98).

Окончательно амплитуда рассеяния (1.102) может быть записана как

$$f = \frac{k}{2i\pi} \int d^2b [S(\mathbf{b}) - 1] e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})}. \quad (1.105)$$

При достаточно высокой энергии, когда фаза рассеяния  $\delta(\mathbf{b})$  мала, мы можем положить  $S(\mathbf{b}) - 1 \approx 2i\delta(\mathbf{b})$ . В этом случае поперечный интеграл (1.105) объединяется с продольным интегралом в (1.104), так что амплитуда рассеяния совпадает с результатом борновского приближения (1.79). Иными словами, в эйкональном подходе сдвиг фазы вдоль траектории, вычисленный в борновском приближении, уходит в показатель экспоненты.

Амплитуда рассеяния вперёд описывается уравнением (1.105) при  $\mathbf{q} = 0$ :

$$f(0) = \frac{k}{2i\pi} \int d^2b [S(\mathbf{b}) - 1]. \quad (1.106)$$

Это *комплексное* (в отличие от борновского приближения) выражение определяет, согласно оптической теореме (1.58), полное сечение

$$\sigma = 2 \int d^2b \operatorname{Re}[1 - S(\mathbf{b})]. \quad (1.107)$$

**Дополнительная литература:** [2], [4], [5], [6], [7].



Тенденция современной физики — разложить всю материальную вселенную на волны, и чтобы не было ничего, кроме волн.

Дж. Х. Джинс. «Таинственная Вселенная»

## Глава 2

### Метод парциальных волн

#### 2.1. Анализ парциальных волн

Если потенциал *изотропный*  $U(\mathbf{r}) = U(r)$ , ситуация упрощается, и мы можем полностью использовать вращательную инвариантность и свойства углового момента. В центральном поле сохраняется орбитальный момент  $\ell$  относительного движения, и можно рассматривать рассеяние индивидуальных *парциальных волн* с определённым  $\ell$ .

Каждая парциальная волна рассеивается независимо, и  $S$ -матрица диагональна в  $\ell$ -представлении. Элементами унитарной  $S$ -матрицы являются комплексные числа

$$S_\ell = e^{2i\delta_\ell}, \quad (2.1)$$

которые могут зависеть только от энергии  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$  относительного движения. В отсутствие поглощения упругая унитарность требует, чтобы все собственные значения  $S$  находились на единичной окружности

$$|S_\ell|^2 = 1, \quad (2.2)$$

так что все *фазы рассеяния*  $\delta_\ell$  действительны. Мы уже встречались с фазами рассеяния и обсуждали их происхождение в приближении высоких энергий, см. уравнения (1.103) и (1.104). Из физического смысла  $S$ -матрицы (1.16) как оператора эволюции начального состояния можно понять, что упругое рассеяние приводит просто к появлению дополнительного сдвига фазы  $2\delta_\ell$  парциальной волны при прохождении через область взаимодействия (разность между полной фазой и невозмущённой фазой свободного движения). Определение (2.1) напоминает классическую картину отклоненной траектории, задача 1.1: половина сдвига фазы  $\delta_\ell$  набирается до и столько же после прохождения точки наибольшего сближения. Эта квазиклассиче-

ская картина полезна, когда в рассеянии участвуют много парциальных волн. Она может быть обобщена на потенциалы, зависящие от спина, и на наличие неупругих каналов.

*Метод парциальных волн* формулирует задачу рассеяния как задачу вычисления фазовых сдвигов. Прежде всего мы должны в подходящих терминах выразить наблюдаемые сечения рассеяния. Задача рассеяния для *бесспиновых* частиц и центрально-симметричного потенциала является *аксиально-симметричной*: только одно направление выделено постановкой эксперимента — направление  $\mathbf{k}$  начального пучка. Примем это направление за ось  $z$ . Угол рассеяния  $\theta$  — это полярный угол вектора  $\mathbf{k}'$ , уравнение (1.48). Благодаря аксиальной симметрии амплитуда рассеяния  $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  не может зависеть от азимутального угла вектора  $\mathbf{k}'$ . Она зависит только от  $\theta$  и энергии, которую мы не будем явно указывать.

Асимптотика волновой функции (1.49) принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{ikr \cos \theta} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (2.3)$$

Амплитуда рассеяния  $f(\theta)$  может быть разложена по полиномам Лежандра, что в точности совпадает с разложением по парциальным волнам с определённым орбитальным моментом  $\ell$ :

$$f(\theta) = \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) f_{\ell}. \quad (2.4)$$

### Задача 2.1

Показать, что сферические функции  $Y_{\ell m}(\mathbf{n}_{\mathbf{k}})$  являются собственными функциями оператора  $\hat{f}$ , уравнение (1.60), и что парциальные амплитуды  $f_{\ell}$ , уравнение (2.4), это соответствующие собственные значения, вырожденные по магнитному квантовому числу  $m$ .

Падающая плоская волна в (2.3) также может быть представлена суперпозицией парциальных волн. Мы уже находили в (1.53) это разложение в асимптотической области:

$$e^{ikr \cos \theta} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) [e^{ikr} - (-)^{\ell} e^{-ikr}]. \quad (2.5)$$

Здесь мы использовали условие полноты для полиномов Лежандра, см. (I.16.146) и (I.16.148). Теперь собираем вместе входящую и уходящую волны

и получаем

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \frac{i}{2kr} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) [(-)^{\ell} e^{-ikr} - (1 + 2ikf_{\ell}) e^{ikr}]. \quad (2.6)$$

Входящая компонента  $\propto e^{-ikr}$  не меняется рассеянием. В противоположность этому уходящая волна искажается. Её амплитуда не равна единице; она приобретает фактор

$$S_{\ell} = 1 + 2ikf_{\ell}. \quad (2.7)$$

Величины  $S_{\ell}$  в уравнении (2.7) – это элементы  $S$ -матрицы, преобразующие падающую волну (точнее, её уходящую часть) в рассеянную волну. Как мы уже обсуждали, для центрального поля  $S$ -матрица должна быть диагональной в  $\ell$ -представлении. Амплитуда  $f$ , рассматриваемая как оператор (1.60), также диагонализуется в этом представлении, и её матричными элементами являются парциальные амплитуды  $f_{\ell}$ . Парциальные волны  $\psi_{\ell}$  (отдельные члены в (2.6)) являются собственными функциями оператора  $\hat{f}$  с соответствующими собственными значениями  $f_{\ell}$ . Выражение (2.7) в точности совпадает с условием унитарности (1.62).

*Дифференциальное* упругое сечение (1.52) есть произведение двух разложений, (2.4) и такого же для сопряжённой функции  $f^*$ . Оно не имеет простого вида, поскольку все парциальные волны *интерферируют* на детекторе, расположенном под определённым углом. Интерференция исчезает в *полном* сечении в силу ортогональности парциальных волн в интегралах по углам. Записывая амплитуду рассеяния (2.4) как

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) (S_{\ell} - 1), \quad (2.8)$$

получаем полное сечение в виде суммы *парциальных сечений*

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{el}} &= \sum_{\ell\ell'} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) f_{\ell} f_{\ell'}^* \int d\theta P_{\ell}(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) \\ &= 4\pi \sum_{\ell} (2\ell + 1) |f_{\ell}|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) |S_{\ell} - 1|^2. \end{aligned} \quad (2.9)$$

## 2.2. Упругое и неупругое сечения

С той же асимптотической волновой функцией (2.6) мы можем вычислить недостающий радиальный поток. Простая алгебра даёт сечение поглощения

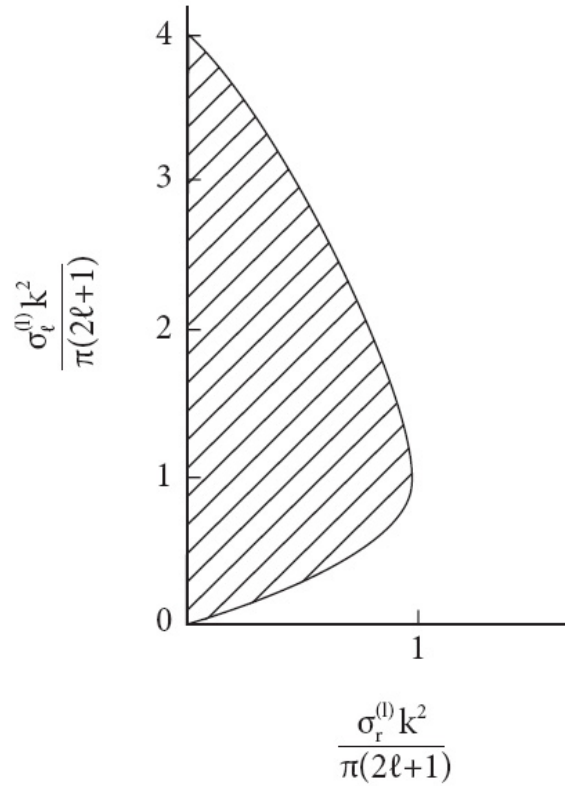


Рис. 2.1. Возможные пределы упругого сечения при заданном неупругом сечении (сечение реакций). Значения внутри заштрихованной области разрешены

(1.44)

$$\sigma_{\text{inel}} = -\frac{1}{v} \int d\omega j_r r^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(1 - |S_{\ell}|^2). \quad (2.10)$$

Таким образом,  $S$ -матрица определяет и упругое сечение, и сечение поглощения. Поглощение здесь входит только суммарно без выделения отдельных каналов. Оно отсутствует, если выполняется условие  $|S_{\ell}|^2 = 1$ , уравнение (2.2). В присутствии поглощения  $|S_{\ell}| < 1$  и фазы  $\delta_{\ell}$  становятся комплексными. Разложение по парциальным волнам имеет простую полуклассическую интерпретацию. В классической механике  $\ell$ -тая парциальная волна соответствует частицам, попадающим в площадь кольца между  $b_{\ell+1}$  и  $b_{\ell}$ , рис. 1.1. Площадь кольца, умноженная на вероятность захвата  $1 - |S_{\ell}|^2$ , даёт неупругое сечение (2.10).

Важный момент заключается в том, что упругое рассеяние,  $|S_\ell| = 1$ , может иметь место в отсутствие поглощения, в то время как обратная ситуация чисто неупругого процесса невозможна. Любое поглощение всегда сопровождается упругим рассеянием. Это так называемый *эффект тени*, типичное проявление волновых свойств. Поглощение искажает падающую волну, вырезая часть волнового фронта. При этом в фурье-разложении искажённой волны с необходимостью появляются новые (дифракционные) компоненты. Рис. 2.1 [8] показывает соотношение между возможными величинами упругого и неупругого сечений.

Полное сечение равно сумме упругого, уравнение (2.10), и неупругого, уравнение (2.10), вкладов:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(2 - S_\ell - S_\ell^*) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(1 - \text{Re}S_\ell). \quad (2.11)$$

Сравнивая (2.11) с (2.8), мы опять приходим к оптической теореме (1.58).

### 2.3. Упругие фазы рассеяния

Здесь мы более подробно рассмотрим случай чисто упругого рассеяния, когда фазы рассеяния  $\delta_\ell$ , определённые уравнением (2.1), действительны. Записывая  $S_\ell - 1$  как  $2i \exp(i\delta_\ell) \sin \delta_\ell$ , выразим амплитуду рассеяния (2.8) в виде

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell. \quad (2.12)$$

Асимптотика волновой функции (2.6) становится

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &\approx \frac{i}{2kr} \sum_{\ell} (-)^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) [e^{-ikr} - (-)^\ell S_\ell e^{ikr}] \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell} i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) [(-i)^\ell e^{2i\delta_\ell + ikr} - i^\ell e^{-ikr}] \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell} i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) e^{i\delta_\ell} [e^{i(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)} - e^{-i(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)}] \\ &= \frac{1}{kr} \sum_{\ell} i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) e^{i\delta_\ell} \sin \left( kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Из последнего выражения видно, что  $\delta_\ell$  есть сдвиг фазы  $\ell$ -той парциальной волны по сравнению с асимптотикой (II.2.80) входящей плоской волны. Как

мы уже отмечали, двойная фаза  $2\delta_\ell$  в  $S_\ell$  набирается на пути к центру и от центра.

В терминах фаз рассеяния упругое сечение (2.10) выглядит следующим образом:

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}. \quad (2.14)$$

Фаза рассеяния, равная  $\delta_{\ell} = n\pi$  при некоторой энергии, отвечает отсутствию рассеяния в данной парциальной волне при данной энергии. Максимум рассеяния (*резонанс*) возникает при  $\delta_{\ell} = \pi/2$ . В резонансе парциальное сечение определяется не геометрическими параметрами системы, а длиной волны  $\lambda = 2\pi/k$ ,

$$\sigma_{\ell}^{\text{max}} = \frac{4\pi(2\ell + 1)}{k^2} = \frac{2\ell + 1}{\pi} \lambda^2. \quad (2.15)$$

Этот предел волновой механики в четыре раза больше, чем классическая площадь кольца (1.14).

Чтобы найти фазы рассеяния, нужно решить радиальное уравнение Шрёдингера для данной парциальной волны и найти решение  $u_{\ell}(r)$ , которое *регулярно* в нуле и имеет нужную асимптотику  $\sim \sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})$ . Этот асимптотический вид определяет фазу рассеяния  $\delta_{\ell}$ . Полная волновая функция  $\psi(\mathbf{r})$  может быть найдена как суперпозиция парциальных волн с коэффициентами  $i^{\ell} \exp(i\delta_{\ell})$ , см. последнюю строку в асимптотическом представлении  $\psi(\mathbf{r})$  (2.13). На практике может быть удобнее найти пару взаимно комплексно сопряжённых решений  $u_{\ell}^{(\pm)}$  с асимптотическим поведением  $\sim \exp(\pm ikr)$ . Эти функции образуют полный набор функций в континууме. Их поведение в начале координат определяется асимптотикой и не является регулярным. Нужно найти их суперпозицию

$$u_{\ell}(r) = A_{\ell} \left[ u_{\ell}^{(-)}(r) - (-)^{\ell} S_{\ell} u_{\ell}^{(+)}(r) \right], \quad (2.16)$$

которая была бы регулярна в начале координат (сравните с (2.6)). Это требование определяет  $S_{\ell}$ .

## 2.4. Аналитичность

$S$ -матрица, рассматриваемая как функция волнового вектора  $k$ , может быть продолжена на комплексные значения этой величины, которая играет

роль параметра в уравнении Шрёдингера. Здесь мы приводим только краткую идею этого весьма продуктивного подхода.

Радиальная функция  $u_\ell(r)$  имеет для действительных  $k$  вид (2.16) с соответствующей асимптотикой. Продолжим эту функцию на комплексные значения  $k$ . Фаза рассеяния  $\delta_\ell$  зависит от  $k$  и перестаёт быть действительной для комплексных  $k$ . Предположим, что при каком-то значении  $k = -i\kappa$ ,  $\kappa > 0$ , т. е. на отрицательной мнимой полуоси фаза  $\delta_\ell(-i\kappa) \rightarrow i\infty$ . Это значит, что  $S$ -матрица обращается в нуль в этой точке:

$$S_\ell(-i\kappa) = e^{2i\delta_\ell(-i\kappa)} = 0. \quad (2.17)$$

В этом случае только первый член, порождаемый  $u_\ell^{(-)}$ , выживает в асимптотике этой парциальной волны (2.16)

$$u_\ell(r) \sim e^{-i(-i\kappa)r} = e^{-\kappa r}. \quad (2.18)$$

Но это асимптотика волновой функции *связанного* состояния при отрицательной энергии

$$\varepsilon = (\hbar^2/2m)(-i\kappa)^2 = -\hbar^2\kappa^2/2m. \quad (2.19)$$

Можно заключить, что связанным состояниям с орбитальным моментом  $\ell$  соответствуют нули матричного элемента  $S_\ell(k)$  на отрицательной мнимой полуоси. Обратное утверждение, вообще говоря, неверно, поскольку имеющиеся связанные состояния не исчерпывают всех нулей  $S_\ell(k)$ .

Заметим теперь, что в уравнение Шрёдингера входит  $k^2$ , а не  $k$ . Формальная замена  $k \rightarrow -k$  должна давать то же решение  $u_\ell(r)$  с точностью до не зависящего от координат фактора. Но при такой замене

$$\begin{aligned} [e^{-ikr} - (-)^\ell S_\ell(k)e^{ikr}] &\rightarrow [e^{ikr} - (-)^\ell S_\ell(-k)e^{-ikr}] \\ &= -(-)^\ell S_\ell(-k)[e^{-ikr} - (-)^\ell S_\ell^{-1}(-k)e^{ikr}]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Отсюда находим, что

$$S_\ell^{-1}(-k) = S_\ell(k), \quad (2.21)$$

т. е. нулям на нижней мнимой полуоси  $k = -i\kappa$  соответствуют *полоса*  $S_\ell(k)$  на верхней мнимой полуоси  $k = +i\kappa$ . Таким образом, знание  $S$ -матрицы на действительной оси и её аналитических свойств даёт также информацию о связанных состояниях без явного использования гамильтониана или волновой функции.

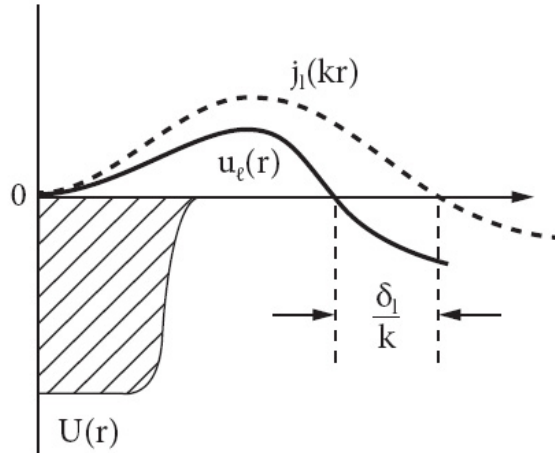


Рис. 2.2. Рассеяние на потенциальной яме

## 2.5. Рассеяние при низких энергиях: примеры

Мы получили формальное решение задачи рассеяния в центральном поле конечного радиуса действия. Все наблюдаемые величины выражаются через бесконечный набор фаз рассеяния  $\delta_\ell$ . Разложение по парциальным волнам особенно удобно при низких энергиях, когда фазы убывают с ростом  $\ell$  и несколько первых членов разложения по парциальным волнам хорошо аппроксимируют полное решение.

Как упоминалось ранее, область низких энергий определяется отношением характерного размера потенциала  $R$  к длине волны  $\lambda$  относительного движения. Когда отношение  $R/\lambda \propto kR$  мало, различие в фазах между волнами, идущими в разных направлениях, невелико и ось падающего пучка не выделена. Это значит, что рассеяние почти изотропно, т. е. наиболее существенными являются вклады  $s$ -волны и, возможно, нескольких других низших парциальных волн. В этом случае можно обрезать ряд по парциальным волнам на малых  $\ell$ .

### Задача 2.2

Найти сечение рассеяния частицы малой энергии на притягивающей потенциальной яме глубиной  $U_0$  и радиусом  $R$  (рис. 2.2).

### Решение.

В случае низкой энергии длина волны велика по сравнению с размерами ямы:  $kR \ll 1$ . Основной вклад в сечение даёт  $s$ -волна. Уравнение

Шрёдингера для функции  $u \propto r\psi$  и для  $\ell = 0$  записывается как

$$u'' + k^2 u = 0, \quad k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}, \quad r > R; \quad (2.22)$$

$$u'' + k'^2 u = 0, \quad k'^2 = \frac{2m(\varepsilon + U_0)}{\hbar^2}, \quad r < R. \quad (2.23)$$

Решение, исчезающее в нуле и имеющее нужную асимптотику, очевидно:

$$u = A \sin k'r, \quad r < R; \quad u = \sin(kr + \delta), \quad r > R. \quad (2.24)$$

Поскольку общая нормировка несущественна, мы имеем только один неизвестный коэффициент  $A$ . Вместе с фазой рассеяния  $\delta$  он должен быть найден из условия непрерывности волновой функции при  $r = R$ . Логарифмическая производная даёт

$$\delta = \tan^{-1} \left( \frac{k}{k'} \tan(k'R) \right) - kR. \quad (2.25)$$

Парциальное сечение (2.14) равно

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta. \quad (2.26)$$

При очень низких энергиях

$$k \rightarrow 0, \quad k'^2 \rightarrow k_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}. \quad (2.27)$$

Если  $k_0 R$  не слишком близко к  $\pi/2$ , то при низких энергиях фаза рассеяния стремится к нулю линейно по  $k$ ,

$$\delta \approx kR \left[ \frac{\tan(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right]. \quad (2.28)$$

При этом амплитуда рассеяния (2.12) и сечение (2.26) конечны. Они традиционно выражаются через *длину рассеяния*

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} f. \quad (2.29)$$

В нашем случае

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta}{k} = -R \left[ \frac{\tan(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right], \quad (2.30)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_0 = 4\pi a^2. \quad (2.31)$$

В мелкой яме,

$$k_0 R \ll 1, \quad \tan(k_0 R) \approx k_0 R [1 + (k_0 R)^2/3], \quad (2.32)$$

мы находим

$$a = -R \frac{(k_0 R)^2}{3}, \quad \sigma_0 = 4\pi R^2 \frac{(k_0 R)^4}{9} = \frac{16\pi}{9} \frac{m^2 U_0^2 R^6}{\hbar^4}, \quad (2.33)$$

т. е. длина рассеяния много меньше радиуса ямы, а сечение рассеяния много меньше геометрического сечения ямы. Этот результат можно также получить, используя первое борновское приближение. Действительно, из (1.81) мы получаем при  $q \rightarrow 0$

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^R dr r^2 (-U_0) = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \frac{R^3}{3}, \quad (2.34)$$

что даёт то же самое сечение (2.33). Большая длина волны перекрывает всю область рассеяния и длина рассеяния определяется в этом пределе *объёмом* ямы.

Будем теперь углублять яму, сохраняя  $k$  малым, но конечным. При  $k_0 R = \pi/2$  мы приходим к *резонансу*. Величина

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \frac{\tan(k' R)}{k'} \quad (2.35)$$

мала по сравнению с  $R$ . Мы можем пренебречь членом  $-kR$  в (2.25) и получить сечение вблизи резонанса:

$$\delta = \tan^{-1} \frac{k}{\gamma}, \quad \sigma_0 = \frac{4\pi}{\gamma^2 + k^2}. \quad (2.36)$$

Для резонансной ямы при  $k \rightarrow 0$  сечение растёт до бесконечности. Условие резонанса указывает на появление связанного состояния в яме, см. разд. II.2.6. При малых положительных энергиях волновая функция внутри ямы слабо зависит от энергии и очень близка к волновой функции появившегося

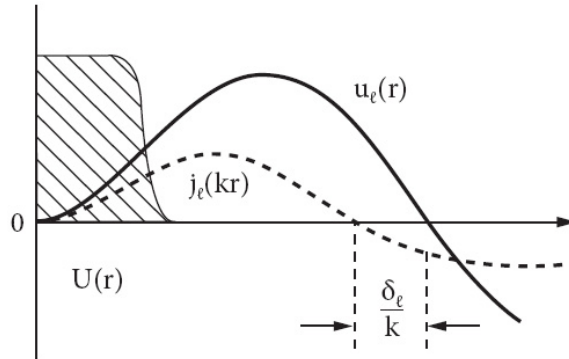


Рис. 2.3. Рассеяние на потенциальном барьере

связанного состояния. Увеличивая глубину ямы, мы увидим уменьшающееся сечение; резонансное условие (2.36) больше не выполняется, и мы можем снова вернуться к нерезонансной формуле, которая даёт ноль сечения (2.31) при  $\tan(k_0 R) = k_0 R$ . При каждом рождении нового связанного состояния есть резонанс, так что сечение быстро колеблется между малым и большим значением в зависимости от глубины. *Формула Вигнера* для резонансного сечения (2.36) действительна вблизи критической глубины, когда ее небольшое изменение приводит к появлению или исчезновению дискретного уровня. Состояние с  $\ell = 0$ , которое не связано, но стало бы связанным при небольшом углублении ямы, называется *виртуальным уровнем*.

### Задача 2.3

Вычислить низко-энергетическое сечение рассеяния частицы на отталкивающем потенциальном барьере (высота  $U_0$ , радиус  $R$ ), рис. 2.3.

#### Решение.

Решение во внутренней области под барьером  $\varepsilon < U_0$  есть

$$u = A \sinh k' R, \quad k'^2 = \frac{2m(U_0 - \varepsilon)}{\hbar^2}. \quad (2.37)$$

Фаза рассеяния даётся (сравните с (2.25))

$$\delta = \tan^{-1} \left( \frac{k}{k'} \tanh(k' R) - k R \right). \quad (2.38)$$

Поскольку  $\tanh x$  меняется от  $-1$  до  $1$ , то резонансов нет, и в пределе низких энергий мы находим длину рассеяния:

$$a = -R \left[ \frac{\tanh(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right] > 0, \quad k_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}; \quad (2.39)$$

отметим, что знак длины рассеяния положителен. Сечение описывается выражением

$$\sigma_0 = 4\pi R^2 \left( \frac{\tanh(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right)^2. \quad (2.40)$$

Для барьера бесконечной высоты, как следует из смысла фазы рассеяния,

$$U_0 \rightarrow \infty, \quad a \rightarrow R, \quad \delta \rightarrow -kR; \quad (2.41)$$

сечение совпадает с площадью поверхности сферы,

$$\sigma_0 \rightarrow 4\pi R^2. \quad (2.42)$$

Это типичный волновой эффект: волна большой длины взаимодействует со всей поверхностью, в то время как классическая частица чувствует только площадь  $\pi R^2$  непроницаемого препятствия, см. (1.13). Для энергий выше барьера  $\varepsilon > U_0$  может опять возникнуть резонансное поведение.

#### Задача 2.4

Найти явный вид углового распределения для потенциального рассеяния, учитывая только  $s$ -волну,  $p$ -волну и их интерференцию.

#### Решение.

Дифференциальное сечение равно  $|f|^2$ , где амплитуда рассеяния  $f$  даётся разложением по парциальным волнам, которое в нашем случае имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{1}{k^2} \left[ \sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1) \cos \theta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta \right]. \quad (2.43)$$

Интерференция  $s$ - и  $p$ -волн противоположной чётности нарушает симметрию по отношению к замене  $\theta \rightarrow \pi - \theta$ .

## 2.6. Фазы и их зависимость от энергии

Для того чтобы оценить зависимость фаз рассеяния от  $\ell$ , выразим фазы через точные радиальные функции  $u_\ell(r)$ .

Вводя безразмерную переменную  $x = kr$ , перепишем радиальное уравнение Шрёдингера в виде

$$u_\ell'' + \left[ 1 - \frac{U}{\varepsilon} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] u_\ell = 0, \quad (2.44)$$

где производная берётся по  $x$ . В подобном уравнении для волновой функции  $v_\ell$  свободного движения

$$v_\ell'' + \left[ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] v_\ell = 0, \quad (2.45)$$

решение с правильной асимптотикой даётся, как мы знаем, в виде

$$v_\ell(x) = x j_\ell(x). \quad (2.46)$$

Удобно определить *вронскиан*

$$W_\ell(r) = v_\ell' u_\ell - v_\ell u_\ell' \quad (2.47)$$

функций  $v_\ell$  и  $u_\ell$ . В асимптотической области мы нормируем наши функции так, чтобы

$$v_\ell \approx \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right), \quad u_\ell \approx \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right). \quad (2.48)$$

Тогда вронскиан (2.47) является в асимптотической области константой,

$$W_\ell(x \gg R) = \sin \delta_\ell. \quad (2.49)$$

Фаза может быть найдена из уравнения для вронскиана

$$W_\ell' + \frac{U}{\varepsilon} u_\ell v_\ell = 0, \quad (2.50)$$

которое легко получить, умножая (2.44) на  $v_\ell$ , (2.45) на  $u_\ell$  и вычитая одно из другого. Интегрируя уравнение (2.50) от  $x = 0$  до  $x = X$ , находим

$$W_\ell(X) = W_\ell(0) - \int_0^X dx \frac{U(x)}{\varepsilon} u_\ell(x) v_\ell(x). \quad (2.51)$$

Предположим, что вблизи начала координат потенциал  $U(x)$  либо не имеет сингулярности, либо имеет сингулярность слабее центробежной энергии

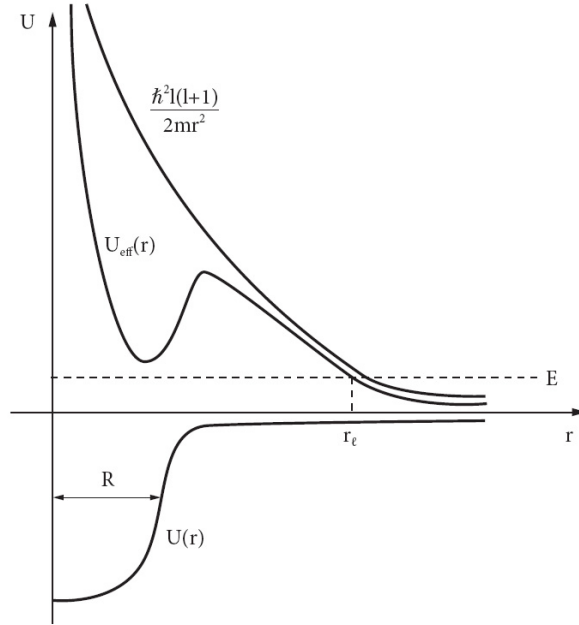


Рис. 2.4. Эффективный потенциал с центробежным членом для момента  $\ell$  и точкой поворота  $r_\ell > R$

$\sim \ell(\ell + 1)/x^2$ , так что можно пренебречь  $U$  в уравнении (2.44). В этом случае при  $x \rightarrow 0$  регулярные решения обоих уравнений пропорциональны друг другу и  $W_\ell(0) = 0$ . В пределе  $X \rightarrow \infty$ , уравнения (2.49) и (2.51) определяют фазы рассеяния *по модулю*  $2\pi$ ,

$$\sin \delta_\ell = - \int_0^\infty dx \frac{U(x)}{\varepsilon} u_\ell(x) v_\ell(x), \quad (2.52)$$

через решения  $u_\ell(x)$ .

Результат (2.52) является точным для «хороших» потенциалов. В области достаточно больших  $\ell$  можно заменить  $u_\ell(x)$  в подынтегральном выражении на свободную функцию  $v_\ell$ . Это было бы очевидно в классическом пределе, где большие  $\ell$  соответствуют большим прицельным параметрам  $b_\ell \simeq l/k > R$ , которые определяют траекторию, лежащую вне области взаимодействия. Но такое же заключение можно сделать и в квантовом случае. Центробежный потенциал  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)/2mr^2$  сильно подавляет обе функции  $u_\ell$  и  $v_\ell$  под барьером, где они пропорциональны  $r^{\ell+1}$ . Точки поворота для

обеих функций почти совпадают (рис. 2.4), если они лежат дальше от начала координат, чем  $R$ . В этом случае влияние потенциала  $U$  везде мало, и можно ожидать также малость фаз рассеяния.

Точки поворота  $\varepsilon = U_\ell(r)$  находятся при  $r_\ell > R$ , если

$$U(r_\ell) \ll \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr_\ell^2} \approx \varepsilon < \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mR^2}. \quad (2.53)$$

Это выполняется при

$$\ell(\ell+1) > \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} R^2 = (kR)^2, \quad (2.54)$$

что фактически совпадает с приведённой выше классической оценкой. Если это условие выполняется, то фаза рассеяния  $\delta_\ell$  мала,  $\sin \delta_\ell \approx \delta_\ell$ , и мы получаем из (2.52)

$$\delta_\ell \approx - \int_0^\infty dx \frac{U(x)}{\varepsilon} v_\ell^2(x). \quad (2.55)$$

Это выражение имеет простой смысл: присутствие потенциала, действующего на невозмущённую волновую функцию, меняет фазу её осцилляций на среднюю величину потенциала, измеренную в естественных временных единицах  $\sim 1/\varepsilon$ .

При достаточно низких энергиях  $kR \ll 1$  условие (2.54) справедливо для всех  $\ell \neq 0$ . Отсюда следует важное практическое заключение, что в рассеянии при низких энергиях только  $s$ -волна может иметь заметную фазу рассеяния. С увеличением энергии начинают давать вклад и высшие парциальные волны. Подынтегральное выражение в (2.55) ограничено радиусом действия потенциала  $R$ . В пределе низких энергий поведение волновых функций здесь определяется центробежным членом  $v_\ell(x) \approx C_\ell x^{\ell+1}$  с константой  $C_\ell$  из (II.2.80). Тогда (2.55) непосредственно даёт низкоэнергетическое поведение фаз рассеяния ( $\ell \neq 0$ ),

$$\delta_\ell \approx - \int_0^\infty dx \frac{U(x)}{\varepsilon} C_\ell^2 x^{2\ell+2} = -C_\ell^2 \frac{k^{2\ell+3}}{\varepsilon} \int_0^\infty dr U(r) r^{2\ell+2}. \quad (2.56)$$

Фазы рассеяния убывают с  $\ell$ ,

$$\delta_\ell \propto k^{2\ell+1} \propto \varepsilon^{\ell+1/2}. \quad (2.57)$$

Мы пришли к выводу, что при низких энергиях (2.53) можно ограничиться низшими парциальными волнами. По этой причине разложение по парци-

альным волнам, будучи эффективным при низких энергиях, дополняет борновское приближение. Для далекодействующих потенциалов, которые спадают степенным образом,  $U \propto 1/r^\alpha$ , требуются отдельные, более аккуратные оценки, см. [4, §132].

Отметим, что в притягивающем потенциале  $U < 0$  фазы рассеяния (2.56) положительны, в то время как для отталкивающего потенциала  $U > 0$  они отрицательны. Это легко понять из сравнения реального решения со свободным: частица в области притяжения проводит больше времени, см. рис. 2.2 и 2.3 (предполагается, что притягивающий потенциал не имеет связанных состояний).

### Задача 2.5

- a) Для изотропного потенциала  $U(r)$  проверить, что (1.74) в точности совпадает с амплитудой (2.12), найденной методом парциальных волн.
- b) Показать, что борновское приближение эквивалентно результату, полученному разложением по парциальным волнам, если фазы рассеяния малы и могут быть вычислены согласно (2.55).

### Решение.

Для доказательства нужно воспользоваться разложением точного решения и плоской волны по парциальным волнам и точным выражением (2.52) для фаз рассеяния.

## 2.7. Длина рассеяния

Мы знаем, что термин «низкие энергии» в задаче рассеяния обычно значит, что длина волны  $1/k = \hbar/mv$  относительного движения велика по сравнению с радиусом действия сил  $R_0$ :

$$kR_0 < 1. \quad (2.58)$$

Например, в нейтрон-протонном рассеянии это условие выполняется вплоть до энергий относительного движения  $\varepsilon$  до  $\sim 5$  ( $\sim 10$  МэВ в системе покоя протона). В области низких энергий только  $s$ -волновое рассеяние  $\ell = 0$  может иметь заметную фазу рассеяния  $\delta_0$  и давать вклад в сечение. Благодаря дополнительному факту, что ядерные силы гораздо слабее в пространственно нечётных состояниях,  $p$ -волновое рассеяние подавлено, так что в действительности сечение  $n - p$ -рассеяния почти изотропно до  $\varepsilon \approx 10 - 15$  МэВ.

Рассмотрим более детально  $s$ -волновое рассеяние в короткодействующем потенциале. Результаты оказываются универсальными в том смысле, что они могут быть описаны малым числом физических параметров, которые нечувствительны к деталям формы потенциала.

Упругое сечение рассеяния для  $s$ -волны (в этом разделе мы обсуждаем только  $s$ -рассеяние и индекс  $\ell = 0$  будем опускать) может быть просто выражено через амплитуду рассеяния

$$f = e^{i\delta} \frac{\sin \delta}{k}, \quad \sigma = 4\pi |f|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta. \quad (2.59)$$

Наш парциально-волновой анализ был развит для центрального потенциала  $U(r)$ . Для любой конкретной формы *короткодействующего потенциала* мы можем найти радиус  $R$  такой, что при  $r > R$  потенциал исчезающе мал и может быть опущен. Вне потенциала решение  $\psi(r) = u(r)/r$  задачи рассеяния имеет универсальную форму для  $\ell = 0$

$$u(r) = \frac{e^{i\delta}}{k} \sin(kr + \delta), \quad r > R, \quad (2.60)$$

где фаза рассеяния  $\delta$  зависит от энергии или от  $k$ . Условие сшивки внешней функции (2.60) с внутренней функцией из области потенциала может быть сформулировано, как и в проблеме связанных состояний, с помощью логарифмической производной  $\lambda$  внутренней волновой функции,

$$\left( \frac{u'}{u} \right)_{r=R-0} \equiv \lambda = k \cot(kR + \delta). \quad (2.61)$$

Таким образом, фаза рассеяния  $\delta$  определяется через единственный параметр  $\lambda$ . Для прямоугольной ямы или барьера точное решение изучалось соответственно в задачах 2.2 и 2.3. Сразу же виден один частный случай: для очень сильного отталкивающего потенциала волновая функция близка к нулю на границе, в то время как её производная конечна, так что  $\lambda \rightarrow \infty$  и фаза рассеяния есть

$$\delta = -kR, \quad (2.62)$$

что подтверждает физический смысл фазы рассеяния: волна не проникает внутрь и соответственно набирает меньшую фазу.

В общем случае фаза рассеяния при малых  $k$  пропорциональна  $k$ . Это имело место в вышеупомянутых задачах. Коэффициент пропорционально-

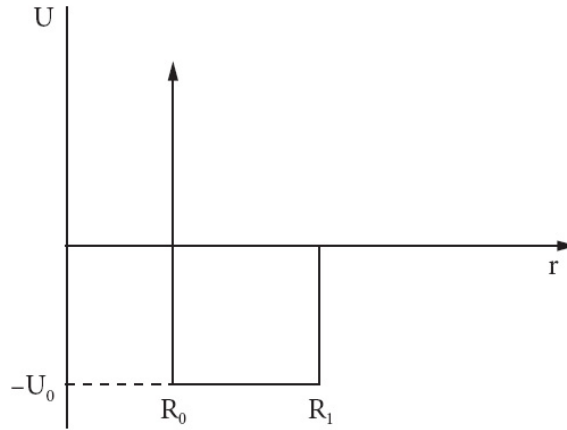


Рис. 2.5. Потенциал для задачи 2.6

сти, взятый с обратным знаком, называется *длиной рассеяния* (2.29)

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta(k)}{k} = -a. \quad (2.63)$$

Согласно уравнению (2.59), связывающему фазу и амплитуду рассеяния  $f$ , длина рассеяния — это предельное значение амплитуды  $f$  при низких энергиях

$$\lim_{k \rightarrow 0} f = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{e^{i\delta} \sin \delta}{k} = -a. \quad (2.64)$$

Величина сечения (2.59) в этом пределе равна

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma = 4\pi a^2. \quad (2.65)$$

### Задача 2.6

Вычислить длину рассеяния для потенциала (рис. 2.5) с твёрдой отталкивающей сердцевиной при  $r = R_0$  и притягивающей ямой глубиной  $U_0$  между  $r = R_0$  и  $r = R_1$  (грубая картина молекулярного потенциала типа Ван-дер-Ваальса.)

### Решение.

Решая уравнение Шрёдингера, мы находим

$$a = R_1 - \frac{\tan[k_0(R_1 - R_0)]}{k_0}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{mU_0}{\hbar^2}}. \quad (2.66)$$

Без твёрдой сердцевинки  $R_0 = 0$  результат совпадает с (2.39). Длина рассеяния опять имеет резонансы для притягивающей ямы при  $k_0(R_1 - R_0) = \pi(n - 1/2)$  для целых  $n \geq 1$ .

Для непроницаемой стенки длина рассеяния совпадает с радиусом  $R$  стенки. Однако в общем случае значение длины рассеяния может значительно отличаться от радиуса потенциала  $R$ . Длина рассеяния может быть непосредственно определена по поведению внешней волновой функции (2.60), которую в пределе  $k \rightarrow 0$  можно записать около границы как линейную функцию

$$u(r) \approx r - a. \quad (2.67)$$

Поэтому длина рассеяния задается величиной радиальной координаты в точке, где линейная экстраполяция волновой функции (2.67) обращается в ноль.

Для мелких ям, не имеющих связанных состояний, рис. 2.6, а, *внутренняя* волновая функция возрастает на границе,  $\lambda > 0$ , и экстраполяция (2.67) приводит к  $a < 0$ . Углубляя яму больше и больше, мы увеличиваем внутренний волновой вектор и сдвигаем точку пересечения влево. В конце концов абсолютное значение длины рассеяния превышает радиус сил  $R$ . При критической глубине, соответствующей появлению связанного состояния, длина рассеяния идет в  $-\infty$ , рис. 2.6, б, так называемый *унитарный предел*. Если яма имеет связанное состояние, предельное поведение фазового сдвига при нулевой энергии должно быть определено как  $\lim_{k \rightarrow 0} \delta = \pi - ka$ . Если яма становится еще более глубокой, связанное состояние опускается вниз по энергии. Тогда внутренняя волновая функция имеет отрицательную производную на границе,  $\lambda < 0$ , а длина рассеяния возвращается к действительной оси от  $+\infty$ , рис. 2.6, с. С углублением потенциальной ямы мы наблюдаем периодически появление новых связанных состояний, и фазовый сдвиг каждый раз проходит через  $\pi$ . Так как при очень высокой энергии (формально при  $r \rightarrow \infty$ ) движение становится свободным, разница между  $\delta(k \rightarrow 0)$  и  $\delta(k \rightarrow \infty)$  равна  $n\pi$ , где  $n$  равно числу связанных состояний в яме (теорема *Левинсона*).

## 2.8. Резонансное рассеяние при низких энергиях

Большое отрицательное значение длины рассеяния показывает, что потенциальная яма почти готова приобрести связанное  $s$ -волновое состояние. В таком случае говорят, что есть *виртуальный уровень*, сравните с задачей 2.2. Для характеристики энергетической зависимости амплитуды

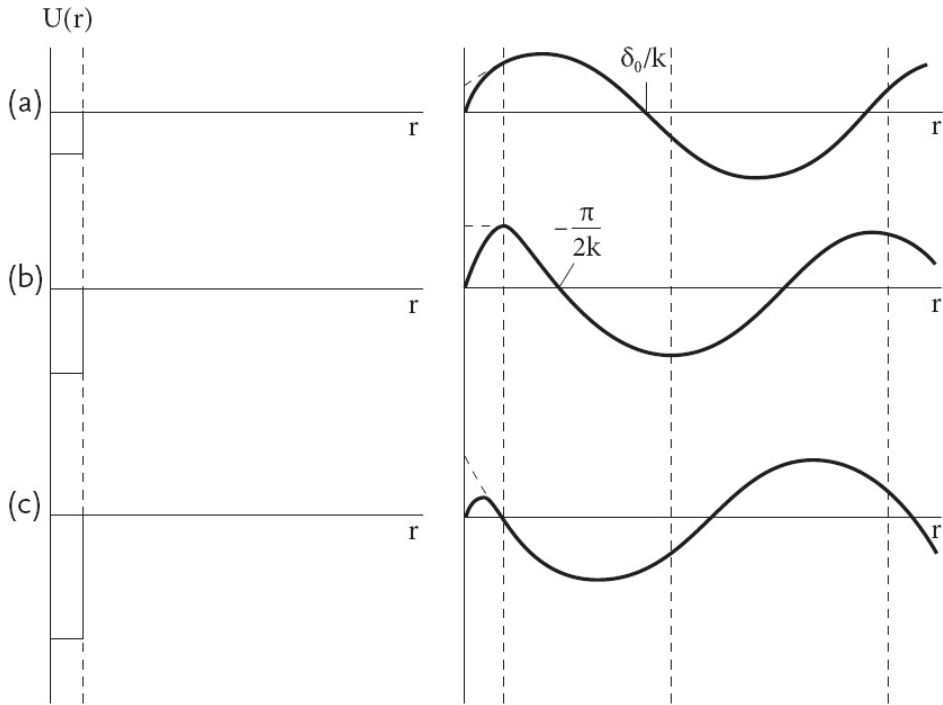


Рис. 2.6. Радиальные волновые функции для отрицательной (а), почти бесконечной (б) и положительной (с) длины рассеяния

рассеяния и сечения за рамками предела  $k \rightarrow 0$ , особенно в случае слабо связанного или виртуального состояния, мы включим следующий член низкоэнергетического разложения (Л.Ландау, Я. Смородинский, 1944).

Для упругого рассеяния в центральном поле отсутствие поглощения позволяет преобразовать выражение (1.61) для парциальных амплитуд  $f_\ell$  (собственные значения  $\hat{f}$ ) в уравнение

$$\text{Im} f_\ell = k |f_\ell|^2, \quad \text{or} \quad \text{Im} \left( \frac{1}{f_\ell} \right) = -k. \quad (2.68)$$

Поэтому общее выражение для амплитуды  $f_\ell$ , совместимое с условием унитарности, имеет вид  $1/f_\ell = g_\ell - ik$  или

$$f_\ell = \frac{1}{g_\ell - ik}, \quad (2.69)$$

где  $g_\ell$  (для действительной энергии) является *действительной* функцией с размерностью обратной длины. Простая алгебра с использованием соотношения  $f_\ell = \exp(i\delta_\ell) \sin \delta_\ell/k$  определяет функцию  $g_\ell(k)$  как

$$g_\ell = k \cot \delta_\ell. \quad (2.70)$$

Будучи действительной при действительной энергии,  $g_\ell$  может рассматриваться как функция  $\varepsilon$ , т. е.  $k^2$ . При низких энергиях, как мы видели в (2.57),  $\delta_\ell \propto k^{2\ell+1}$ . Поэтому  $f_\ell \propto k^{2\ell}$  и разложение  $g_\ell$  начинается с члена  $\sim 1/k^{2\ell}$ . Для  $s$ -волнового рассеяния функция  $g_0(k)$  начинается с константы,  $g_0 \rightarrow \gamma$  в пределе низких энергий. Сравнивая (2.69) с определением длины рассеяния, мы можем идентифицировать

$$g_0(0) = \gamma = -\frac{1}{a}. \quad (2.71)$$

В этом приближении мы можем учесть следующий член в знаменателе (2.69), который мнимый и линеен по  $k$ , и получить

$$f_0 = -\frac{1}{(1/a) + ik} \equiv -\frac{1}{\gamma + ik}. \quad (2.72)$$

Это даёт сечение за предельным значением (2.65),

$$\sigma = \frac{4\pi}{\gamma^2 + k^2} = \frac{4\pi a^2}{1 + a^2 k^2}, \quad (2.73)$$

а также его зависимость от энергии (сравните с (2.36)).

В нашем кратком обсуждении аналитичности, разд. 2.4, мы отмечали, что аналитическое продолжение  $S$ -матрицы в комплексную плоскость энергий имеет полюса в точках, соответствующих энергиям связанных состояний. Полюс (2.69) на верхней мнимой оси  $k$  соответствует  $k \rightarrow i\kappa$ , где  $\kappa$  эквивалентна энергии связи  $\varepsilon = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$ . Если есть решение уравнения  $\kappa = -g_0(i\kappa)$  для малых  $\kappa$ ,  $\kappa R < 1$ , мы имеем слабо связанное состояние, и (2.71) показывает, что  $\kappa \approx 1/a = -\gamma$ . В этой ситуации сечение (2.73) при *положительной* энергии  $E = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$  однозначно определяется малой энергией связи слабо связанного состояния (*E. Вигнер, 1933*):

$$\sigma(E) = \frac{2\pi \hbar^2}{m} \frac{1}{E + \varepsilon}. \quad (2.74)$$

Это так называемое *резонансное рассеяние*. Сечение было бы бесконечным, если бы было возможным создать падающий пучок с *отрицательной* энергией  $E = -\varepsilon$ . Поскольку энергия связи мала, то пучок с малой энергией находится почти «в резонансе». Но фаза рассеяния  $\delta_0$  здесь близка к  $\pi$ , в отличие от истинного резонанса, где  $\delta \approx \pi/2$ , как уже отмечалось в связи с задачей 2.2.

Выражение (2.73) фактически носит более общий характер, будучи справедливым, даже если нет связанных уровней. В этом случае  $\gamma^2 \equiv 2m|\varepsilon|/\hbar^2$  определяет энергию  $|\varepsilon|$  *виртуального уровня*, который стал бы реальным связанным состоянием, если бы яма была немного глубже. С заменой  $\varepsilon \rightarrow |\varepsilon|$  резонансная формула (2.74) приложима к обоим случаям. Такая ситуация реализуется в нейтрон-протонном рассеянии в синглетном спиновом состоянии. Синглетная длина рассеяния  $a_s$ , будучи велика и отрицательна, показывает, что глубина ямы близка к критическому значению для появления связанного состояния. Соответствующая виртуальная энергия, определённая через сечение при нулевой энергии  $E$ , или через длину рассеяния

$$\varepsilon_{\text{virt}} = \frac{2\pi\hbar^2}{m\sigma(E \rightarrow 0)} = \frac{\hbar^2}{2ma_s^2}, \quad (2.75)$$

очень мала в ядерном масштабе,  $\varepsilon_{\text{virt}} \approx 70$  КэВ. Поэтому при низких энергиях синглетное  $n - p$ -рассеяние значительно превосходит триплетное.

### Задача 2.7

В нейтрон-протонном рассеянии при низких энергиях  $S$  — полный спин пары сохраняется, но длины рассеяния различны для  $S = 0$  и  $S = 1$  из-за спин-спиновой части ядерных сил. Полагая, что триплетная  $a_t$  и синглетная  $a_s$  длины  $n - p$ -рассеяния известны, найти вероятность рассеяния с переворотом спина (спин-флип) неполяризованных пучков при очень низких энергиях.

### Решение.

Имеются четыре спиновых состояния  $n - p$ -пар, см. разд. II.7.3. Для триплетных состояний с  $S_z = \pm 1$  нет переворота спина и сечение равно  $4\pi a_t^2$ . Состояния с  $S_z = 0$  должны быть переписаны в базисе  $\chi_{SS_z}$  с фиксированной величиной  $S$ :

$$|n \uparrow p \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10} + \chi_{00}), \quad (2.76)$$

$$|n \downarrow p \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10} - \chi_{00}). \quad (2.77)$$

Рассеянная волна для начального состояния (2.76) пропорциональна

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(a_t \chi_{10} + a_s \chi_{00}), \quad (2.78)$$

или, возвращаясь к состояниям с определённой проекцией спина,

$$\frac{1}{2}(a_t + a_s)|n \uparrow p \downarrow\rangle + \frac{1}{2}(a_t - a_s)|n \downarrow p \uparrow\rangle. \quad (2.79)$$

Первый член в (2.79) определяет сечение без переворота спина,  $4\pi(1/4)(a_t + a_s)^2 = \pi(a_t + a_s)^2$ ; второй член определяет сечение с переворотом спина  $\pi(a_t - a_s)^2$ . Такие же результаты имеют место и для начального состояния (2.77). Все четыре начальных состояния равновероятны. Поэтому полное сечение, усреднённое по проекциям спина, равно

$$\sigma = \frac{1}{4}[2 \cdot 4\pi a_t^2 + 2\pi(a_t + a_s)^2 + 2\pi(a_t - a_s)^2]. \quad (2.80)$$

Сечение с переворотом спина равно

$$\sigma_{\text{flip}} = \frac{1}{4} \cdot 2\pi(a_t - a_s)^2, \quad (2.81)$$

и вероятность переворота спина находится как

$$\frac{\sigma_{\text{flip}}}{\sigma} = \frac{(a_t - a_s)^2}{4a_t^2 + (a_t + a_s)^2 + (a_t - a_s)^2}. \quad (2.82)$$

Для известных значений длин рассеяния вероятность (2.82) равна 0,65.

## 2.9. Эффективный радиус

Следующий член низкоэнергетического разложения амплитуды рассеяния (2.69) или функции  $g_0$  из (2.70, 2.71) квадратичен по  $k$ ,

$$g_0(k) = k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0 k^2 + O(k^4). \quad (2.83)$$

Это определение вводит новый параметр размерности длины  $r_0$ , который называется *эффективный радиус*. Добавка к  $s$ -волне, связанная с эффективным радиусом, более важна, чем малый вклад  $p$ -волны, который даёт поправку к амплитуде рассеяния более высокого,  $\sim (kR)^3$  порядка. Раз-

ложения, подобные (2.83), когда вид амплитуды рассеяния (или других характеристик взаимодействия частиц) устанавливается из аналитичности и других общих ограничений, а параметры находятся из экспериментальных данных, широко используются в так называемой *эффективной теории поля* [9].

В этом улучшенном приближении амплитуда рассеяния (2.69) может быть представлена как

$$f_0(k) = \frac{1}{(-1/a) + (r_0 k^2/2) - ik}. \quad (2.84)$$

Для полюса  $k = i\kappa$  аналитического продолжения мы имеем теперь

$$\kappa = \frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0\kappa^2. \quad (2.85)$$

В качестве примера мы обсудим приложение к  $n - p$ -рассеянию при низких энергиях. Значения длин рассеяния и эффективных радиусов, которые используются в (2.85), различны для триплетного и синглетного состояний. Выражение (2.85) позволяет вычислить триплетный эффективный радиус  $r_{0t}$  через триплетную длину рассеяния  $a_t$  и энергию связи дейтрона  $\varepsilon = \hbar^2\kappa^2/2m$  (единственное связанное  $n - p$ -состояние *дейтрон* имеется в спиновом триплете,  $S = 1$ ). Экспериментальные данные дают  $r_{0t} = 1,7$  фм, в согласии с (2.85), и  $r_{0s} = 2,7$  фм. Эффективный радиус всегда положителен [10] и имеет величину, близкую к радиусу сил. Поэтому он предпочтителен как мера радиуса действия сил по сравнению с длиной рассеяния, которая, будучи очень чувствительной к существованию связанных состояний, может менять знак и сильно отличаться от  $R$ .

Оба параметра — длина рассеяния и эффективный радиус не дают конкретной информации о форме и детальном поведении потенциала. Более высокие порядки в разложении (2.83) были бы более информативны, но они экранируются вкладами высших парциальных волн. На практике низкоэнергетическое разложение мало полезно за рамками приближения эффективного радиуса.

## 2.10. Рассеяние при наличии спин-орбитального взаимодействия

Число наблюдаемых возрастает, если падающий пучок *поляризован* или/и измеряется поляризация конечных частиц. В этих случаях мы должны

рассматривать амплитуду рассеяния как *оператор по отношению к спиновым переменным*, в дополнение к её роли как оператору в координатном пространстве, ответственному за рассеяние  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ , см. уравнение (1.60).

Рассмотрим рассеяние частицы со спином  $1/2$  (например, нуклон) на системе со спином  $0$  (например, ядро). Мы обобщим понятие упругого рассеяния, включив сюда случаи, когда вырожденные спиновые состояния частицы могут меняться при рассеянии наряду с направлением движения. Относительная кинетическая энергия при этом не меняется, что обосновывает термин «упругое» и для этого случая. Пусть падающая волна находится в заданном спиновом состоянии

$$\psi_i = e^{ikz} \chi_\mu(s_z), \quad (2.86)$$

со спиновой функцией  $\chi_\mu$  для определённой проекции спина  $\mu = \pm 1/2$  на ось пучка  $z$ . Детектор регистрирует рассеянную волну в направлении  $\mathbf{k}'$  и в спиновом состоянии  $\chi_{\mu'}$ . Случай  $\mu' \neq \mu$  называют рассеянием с переворотом спина (*спин-флип-рассеяние*), как в задаче 2.7. Это, конечно, возможно только если взаимодействие с мишенью зависит от спиновых переменных; в противном случае проекция спина сохраняется.

Важным практическим примером является *спин-орбитальное взаимодействие*  $\sim (\boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s})$ ; его роль в атомной физике обсуждалась в гл. II.8. В *неполяризованном* пучке спиновые проекции  $\pm 1/2$  имеются с равной вероятностью. Необходимо подчеркнуть, что такой пучок не может описываться чистой волновой функцией. Результаты должны быть получены отдельно для каждой возможной проекции  $\mu$  и затем арифметически усреднены по распределению вероятностей проекций начального спина. Это пример *смешанного квантового состояния*, описываемого *матрицей плотности* (см. гл. 17).

Таким образом, начальное состояние описывается *ансамблем* поляризаций. Вектор *поляризации*  $\mathbf{P}$  начального пучка есть среднее значение оператора спина  $\mathbf{s}$  усреднённого по ансамблю и отнесённого к его максимальному значению  $1/2$

$$\mathbf{P} = \frac{\overline{\langle \mathbf{s} \rangle}}{1/2} = \overline{\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle}, \quad (2.87)$$

где сначала берётся диагональный матричный элемент  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  и затем усредняется (черта вверху) по ансамблю частиц пучка.

В общем случае начальное состояние не является аксиально симметричным: в дополнение к направлению  $z$  распространения оно характеризуется вектором поляризации. Рассеяние теперь может зависеть от обоих углов

рассеянной частицы,  $\theta$  и  $\varphi$ . Вместо (1.49) асимптотический вид волновой функции становится

$$\psi(\mathbf{r}, s_z) \approx \left[ e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \hat{f}(\theta, \varphi) \right] \chi_\mu(s_z), \quad (2.88)$$

где во входящей волне спиновое состояние такое же, как в начальном пучке, в то время как в расходящейся волне оно может быть изменено амплитудой рассеяния  $\hat{f}$ ; шляпка здесь обозначает оператор в спиновом пространстве

$$\hat{f} \chi_\mu = \sum_{\mu'} f_{\mu'\mu} \chi_{\mu'}. \quad (2.89)$$

Для упругого рассеяния на *бесспиновой* мишени или на любой *неполяризованной* мишени со случайным распределением спинов, по которым нужно усреднять, сохраняющимися квантовыми числами являются  $\ell$ , чётность  $(-)^{\ell}$ ,  $j = \ell \pm 1/2$  и  $j_z$ . Проекции  $\ell_z$  и  $s_z$  в общем случае не сохраняются по отдельности. Входящая волна с фиксированными проекциями  $\ell_z = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]_z / \hbar = 0$  и  $s_z = \mu$  не имеет определённого  $j$ , будучи суперпозицией  $j = \ell \pm 1/2$ . Но взаимодействие с мишенью зависит от точных квантовых чисел, включая  $j$ . Как было видно из примера со спин-орбитальной связью в разд. II.8.1, взаимодействие различно для двух возможных значений  $j$ . Каждая компонента с определённым  $j$  переходит в себя, приобретая только фазу. Это значит, что  $S$ -матрица диагональна в  $(\ell, j)$ -представлении. Её диагональные матричные элементы дают фазы рассеяния

$$S_{\ell j} = e^{2i\delta_{\ell j}}. \quad (2.90)$$

Мы имеем теперь две фазы рассеяния  $\delta_{\ell, j=\ell \pm 1/2}$  для каждого  $\ell$ , которые мы обозначим  $\delta_{\ell}^{(\pm)}$ ; соответствующие матричные элементы (2.90) равны  $S_{\ell}^{(\pm)}$ .

Начальное состояние может быть разложено с помощью ККГ по базису состояний с определённым  $j$ , и тогда каждое из них приобретает свою фазу. Вместо вычисления ККГ мы можем получить желаемое разложение в операторном виде. Пусть  $\Lambda_{\ell}^{(\pm)}$  являются проекционными операторами, отбирающими компоненты с  $j = \ell \pm 1/2$  из любого произведения  $\ell$ -той парциальной волны и спиновой функции спина  $1/2$ . В терминах этих

операторов оператор амплитуды рассеяния (2.8) становится

$$\hat{f}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left[ (S_{\ell}^{(+)} - 1)\Lambda_{\ell}^{(+)} + (S_{\ell}^{(-)} - 1)\Lambda_{\ell}^{(-)} \right] P_{\ell}(\cos \theta). \quad (2.91)$$

Скалярное произведение  $(\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = 2(\boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s})$  имеет собственные значения  $\ell$  и  $-(\ell + 1)$  для  $j = \ell + 1/2$  и  $j = \ell - 1/2$  соответственно (задача П.5.6). Проекционные операторы задаются выражениями

$$\Lambda_{\ell}^{(+)} = \frac{\ell + 1 + (\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma})}{2\ell + 1}, \quad \Lambda_{\ell}^{(-)} = \frac{\ell - (\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma})}{2\ell + 1}, \quad \Lambda_{\ell}^{(+)} + \Lambda_{\ell}^{(-)} = 1. \quad (2.92)$$

Зависимость от  $\varphi$  возникает в результате переворота спина, вызываемого понижающими и повышающими операторами  $\sigma_{\pm}$ , которые сопровождаются в (2.92) дополняющими операторами  $\ell_{\mp}$ , компенсирующими переворот спина изменением орбитальной проекции.

Используя явный вид (2.92), амплитуда рассеяния (2.91) становится

$$\hat{f}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} \left[ (\ell + 1)(S_{\ell}^{(+)} - 1) + \ell(S_{\ell}^{(-)} - 1) + (S_{\ell}^{(+)} - S_{\ell}^{(-)})(\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right] P_{\ell}(\cos \theta). \quad (2.93)$$

Действие оператора  $(\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma})$  на полином Лежандра легко вычислить в явном виде. Компоненты орбитального момента найдены в задаче П.1.10. Компонента  $\ell_z$  не даёт вклада в (2.93), так что

$$(\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma})P_{\ell} = i(\sigma_x \sin \varphi - \sigma_y \cos \varphi) \frac{dP_{\ell}}{d\theta}. \quad (2.94)$$

Производная  $dP_{\ell}/d\theta$  есть *присоединённый полином Лежандра*  $-P_{\ell 1}$ , см. (П.1.139) (сферическая функция  $Y_{\ell 1}$  пропорциональна  $\exp(i\varphi)P_{\ell 1}$ ).

Комбинация в скобках в (2.94) может быть выражена через единичный вектор  $\boldsymbol{\nu}$  нормали к *плоскости рассеяния*, образованной начальным  $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$  и конечным  $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$  волновыми векторами. Вектор  $\mathbf{n}$  направлен вдоль оси  $z$ . Вектор  $\mathbf{n}'$  имеет полярный и азимутальный углы  $\theta$  и  $\varphi$ . Поэтому

$$\boldsymbol{\nu} = \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{n}']}{|[\mathbf{n} \times \mathbf{n}']|} = \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{n}']}{\sin \theta} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0). \quad (2.95)$$

Тогда находим

$$(\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma})P_{\ell} = i(\sigma_x \sin \varphi - \sigma_y \cos \varphi)(-P_{\ell 1}) = i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nu})P_{\ell 1}. \quad (2.96)$$

Окончательно амплитуда рассеяния (2.93) записывается в виде

$$\hat{f}(\theta, \varphi) = A(\theta) + B(\theta)(\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (2.97)$$

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} \left[ (\ell + 1)(e^{2i\delta_{\ell}^{(+)}} - 1) + \ell(e^{2i\delta_{\ell}^{(-)}} - 1) \right] P_{\ell}(\cos \theta), \quad (2.98)$$

$$B(\theta) = \frac{1}{2k} \sum_{\ell} \left[ e^{2i\delta_{\ell}^{(+)}} - e^{2i\delta_{\ell}^{(-)}} \right] P_{\ell 1}(\theta). \quad (2.99)$$

Вид амплитуды (2.97) единственный, который допускается общими требованиями симметрии. Действительно, из-за сохранения полного момента и чётности  $\hat{f}$  может зависеть только от скаляров (не псевдоскаляров)  $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \cos \theta$  и  $(\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ , так как  $\boldsymbol{\nu}$  есть единственный аксиальный вектор, построенный из полярных векторов  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{n}'$ . Поскольку для спина 1/2 все степени операторов спина сводятся к линейным функциям, мы приходим к выражению (2.97).

Азимутальная асимметрия связана только с нормалью  $\boldsymbol{\nu}$  к плоскости рассеяния. Без спин-орбитальных сил рассеяние не зависит от взаимной ориентации  $\boldsymbol{\ell}$  и  $\mathbf{s}$ . Тогда фазы для двух значений  $j$  совпадают и  $B(\theta)$  исчезает вместе с азимутальной асимметрией. Амплитуда  $A(\theta)$  в выражении (2.98) сводится в этом случае к стандартному выражению (2.8).

## 2.11. Поляризация и азимутальная асимметрия

Чтобы найти наблюдаемые величины из операторной амплитуды (2.97), мы должны вычислить матричный элемент  $f_{\mu'\mu} = \langle \chi_{\mu'} | \hat{f} | \chi_{\mu} \rangle$ , который даёт амплитуду рассеяния в направлении  $\mathbf{n}'(\theta, \varphi)$  с изменением спиновой проекции  $\mu \rightarrow \mu'$ . Соответствующее дифференциальное сечение равно

$$\left( \frac{d\sigma}{do} \right)_{\mu \rightarrow \mu'} = |f_{\mu'\mu}|^2. \quad (2.100)$$

Если конечная поляризация не измеряется, сечение есть некогерентная сумма по всем возможным  $\mu'$

$$\left( \frac{d\sigma}{do} \right)_{\mu} \equiv \sum_{\mu'} \left( \frac{d\sigma}{do} \right)_{\mu \rightarrow \mu'} = (\hat{f}^{\dagger} \hat{f})_{\mu\mu}, \quad (2.101)$$

где последнее выражение получено для фиксированного начального  $\mu$ . Таким образом, в этом случае мы должны вычислять среднее значение оператора  $\hat{f}^{\dagger} \hat{f}$  по начальному состоянию.

Сумма по начальным и конечным спиновым состояниям в общем случае сводится к вычислению следа в соответствующем пространстве

$$\sum_{fi} |f_{fi}|^2 = \sum_i \left( \sum_f f_{fi}^* f_{fi} \right) = \sum_i (f^\dagger f)_{ii} = \text{Tr}(f^\dagger f). \quad (2.102)$$

Для неполяризованого состояния начальные значения  $\mu$  равновероятны. Усредняя по ним, мы получаем, как и в (2.102),

$$\overline{\frac{d\sigma}{do}} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \left( \frac{d\sigma}{do} \right)_{\mu} = \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{f}^\dagger \hat{f}). \quad (2.103)$$

Для нашего вида амплитуды (2.103) легко найти (следы матриц Паули равны нулю), что

$$\overline{\left( \frac{d\sigma}{do} \right)_{\text{unpol}}} = |A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2, \quad (2.104)$$

с отсутствием азимутальной асимметрии.

Для начального пучка с различным числом частиц  $N_{\pm}$  с проекцией  $\pm$  мы имеем ненулевую поляризацию  $\mathbf{P}$ , см. (2.87). Среднее сечение (2.101) должно вычисляться с учётом этого факта:

$$\overline{\frac{d\sigma}{do}} = \overline{\langle \hat{f}^\dagger \hat{f} \rangle} = |A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2 + 2\text{Re}(A^* B)(\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{P}). \quad (2.105)$$

Такой эксперимент обнаруживает *азимутальную асимметрию*, определяемую начальной поляризацией, перпендикулярной к плоскости рассеяния. Стандартный способ представления этого результата — введение коэффициента асимметрии  $\alpha$ :

$$\overline{\frac{d\sigma}{do}} = \overline{\left( \frac{d\sigma}{do} \right)_{\text{unpol}}} \left( 1 + \alpha(\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{P}) \right), \quad (2.106)$$

$$\alpha = \frac{2\text{Re}(A^* B)}{|A|^2 + |B|^2}. \quad (2.107)$$

Для конечного (рассеянного) пучка мы определяем поляризацию  $\mathbf{P}'$  так, чтобы, будучи умноженной на плотность рассеянной волны  $(\hat{f}^\dagger \hat{f})_{\mu\mu}$ , она давала бы средний спин рассеянной волны в единицах  $1/2$ , как в (2.87),

$$(\hat{f}^\dagger \hat{f})_{\mu\mu} \mathbf{P}' = \langle (\hat{f} \chi_{\mu}) | \boldsymbol{\sigma} | (\hat{f} \chi_{\mu}) \rangle = (\hat{f}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \hat{f})_{\mu\mu}, \quad (2.108)$$

или, усредняя (черта сверху) по начальному пучку,

$$\mathbf{P}' = \frac{\overline{(\hat{f}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \hat{f})_{\mu\mu}}}{\overline{(\hat{f}^\dagger \hat{f})_{\mu\mu}}}. \quad (2.109)$$

Поляризация из-за спин-орбитального взаимодействия возникает даже, если начальный пучок был неполяризован. Единственный аксиальный вектор в задаче это опять вектор  $\boldsymbol{\nu}$  нормали к плоскости рассеяния. Поэтому без всяких вычислений мы знаем, что в этом случае

$$\mathbf{P}' = \beta \boldsymbol{\nu}. \quad (2.110)$$

Простое вычисление среднего по ансамблю неполяризованных спинов в (2.109) определяет коэффициент  $\beta$ :

$$\beta = \frac{2\text{Re}(A^*B)}{|A|^2 + |B|^2} = \alpha. \quad (2.111)$$

Мы пришли к важному утверждению: *поляризация  $\beta$  начального неполяризованного пучка равна асимметрии  $\alpha$  (2.106, 2.107) в рассеянии поляризованного пучка на той же мишени. Если начальная поляризация  $\mathbf{P}$  также присутствует, то результат будет более громоздким, но он также может быть выведен из (2.109).*

### Задача 2.8

Найти в терминах амплитуд  $A$  и  $B$  в (2.98) и (2.99) поляризацию  $\mathbf{P}'$ , полученную в результате рассеяния частиц со спином  $1/2$  и начальной поляризацией  $\mathbf{P}$  на бесспиновой мишени.

**Решение.**

$$\mathbf{P}' = \frac{2\text{Re}(A^*B)\boldsymbol{\nu} + (|A|^2 - |B|^2)\mathbf{P} + 2|B|^2\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{P}) - 2\text{Im}(A^*B)[\boldsymbol{\nu} \times \mathbf{P}]}{|A|^2 + |B|^2 + 2\text{Re}(A^*B)(\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{P})}. \quad (2.112)$$

Глядя на выражения для амплитуды (2.97 – 2.99) и коэффициенты асимметрии  $\alpha$  и поляризации  $\beta$ , можно сделать следующее наблюдение: эффекты поляризации и азимутальной асимметрии неполяризованного пучка исчезают в первом борновском приближении. В этом случае фазы рассеяния малы. Используя разложение  $S$ -матричных элементов  $\exp(2i\delta) \approx 1 + 2i\delta$  мы видим, что  $A(\theta)$  есть действительная величина, а  $B(\theta)$  — мнимая, так что  $A^*B$  является мнимым и  $\alpha = \beta = 0$ . Этот результат связан с инвариант-

ностью относительно обращения времени и специфическими особенностями борновского приближения.

Для системы, инвариантной относительно обращения времени, вероятность процесса не меняется при перемене начального и конечного состояний и изменении знаков всех импульсов и спинов (*детальное равновесие*, которое будет обсуждаться ниже). Амплитуда (2.97) удовлетворяет этому условию. Линейный по  $(\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\sigma})$  член, который появляется в сечении (2.105) как результат интерференции между нормальной  $A$  и спин-флиповой  $B$  амплитудами, инвариантен относительно отражения времени. Действительно, поляризация меняет знак, но и вектор нормали  $\boldsymbol{\nu}$  также меняет знак, потому что при отражении времени  $\mathbf{k} \Rightarrow -\mathbf{k}'$  и  $\mathbf{k}' \Rightarrow -\mathbf{k}$ :

$$\boldsymbol{\nu} \sim [\mathbf{k} \times \mathbf{k}'] \Rightarrow [(-\mathbf{k}') \times (-\mathbf{k})] \sim -\boldsymbol{\nu}. \quad (2.113)$$

В борновском приближении амплитуда рассеяния мала и поэтому эрмитова. Это следует из условия унитарности (1.61), где можно пренебречь квадратичным членом в правой части. Это видно также прямо из наших выражений (2.97 – 2.99): величина  $A$  действительна при малых фазах,  $\boldsymbol{\sigma}$  – эрмитовский,  $\boldsymbol{\nu}$  меняет знак при транспозиции  $\mathbf{n} \leftrightarrow \mathbf{n}'$ , но знак восстанавливается при комплексном сопряжении в этом члене, поскольку величина  $B$  мнима при малых фазах. Для эрмитовской амплитуды  $\hat{f}$  вероятность не меняется при простой перестановке начальных и конечных состояний без изменений знаков импульсов и спинов. Из этих двух инвариантных операций следует инвариантность относительно только изменения знаков импульсов и спинов без перестановки начального и конечного состояний. Но из-за симметрии относительно инверсии и вращений  $\mathbf{P}'$  направлена вдоль  $\boldsymbol{\nu}$ , см. (2.110). При изменении знаков спинов и импульсов  $\mathbf{P}'$  меняет знак, в то время как  $\boldsymbol{\nu}$  не меняет, поэтому  $\mathbf{P}' = 0$ . Этот результат довольно общий и не ограничивается частицами спина 1/2; всегда в борновском приближении поляризация первоначально неполяризованного пучка не возникает.

Поляризация может появиться даже в борновском приближении, если эффективный рассеивающий потенциал является *комплексным*. Спин-орбитальный потенциал с мнимой частью, ответственной за поглощение частиц в неупругие каналы, нарушает эрмитовость амплитуды рассеяния и допускает появление поляризации.

### Задача 2.9

Нуклон рассеивается на ядре, которое порождает *комплексный* потенциал  $U(r) = (1 + i\xi)V(r)$  (где константа  $\xi$  и  $V(r)$  действительны) и спин-

орбитальный потенциал, который по аналогии с атомной спин-орбитой II.8.1 имеет вид

$$\hat{U}_{\ell s} = -\eta \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} (\hat{\ell} \cdot \hat{s}), \quad (2.114)$$

с константой  $\eta$ , имеющей размерность квадрата длины. Вычислить в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния неполяризованного пучка и возникающую поляризацию  $\mathbf{P}'$  рассеянных частиц.

**Решение.**

Сечение даётся выражением

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = |f_B(\theta)|^2 \left( 1 + \xi^2 + \frac{1}{4} k^4 \eta^2 \sin^2 \theta \right), \quad (2.115)$$

где  $f_B(\theta)$  есть борновская амплитуда для потенциала  $V(r)$ . Поляризация равна

$$\mathbf{P} = \beta \boldsymbol{\nu}, \quad \beta = \frac{k^2 \eta \xi \sin \theta}{1 + \xi^2 + k^4 \eta^2 \sin^2 \theta / 4}. \quad (2.116)$$

**Дополнительная литература:** [2], [4], [5], [9], [11], [12], [13], [14], [15]

Возможно, какая-то другая наука может оказаться более полезной, но никакая не имеет такой красоты и прелести в своей полезности, как оптика. Это цветок всей философии, и только через нее можно познать другие науки.

*Р. Бэкон. «Большое сочинение»*

## Глава 3

### Дополнительные вопросы теории рассеяния

#### 3.1. Классическое и квантовое рассеяние

Как следует из нашего первого обращения (разд. 1.1) к классической картине, полное классическое сечение рассеяния

$$\sigma_{\text{cl}} = \int db 2\pi b \quad (3.1)$$

определяется интегрированием по всем *прицельным параметрам*  $b$ , для которых рассеяние имеет место. Если потенциал  $U(\mathbf{r})$  не исчезает полностью при  $b > b_{\text{max}}$ , как это было в задаче 1.1, то полное классическое сечение (3.1) *бесконечно*. Но *квантовое* упругое сечение

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\theta |f|^2 \quad (3.2)$$

оказывается *конечным*, если потенциал спадает на больших расстояниях быстрее, чем  $1/r^2$ .

Классическое рассмотрение может стать несправедливым для больших прицельных параметров из-за того, что большим расстояниям соответствуют малые углы рассеяния  $\theta$ . А для того, чтобы использовать классическую картину, угол отклонения  $\theta$  должен превышать квантовую неопределённость  $\Delta\theta$  направления траектории. В этом же смысле неопределённость  $\Delta b$  прицельного параметра должна быть мала по сравнению с величиной  $b$ . Малый классический угол отклонения  $\theta$  можно оценить через компоненту импульса  $p_{\perp}$ , перпендикулярную начальному направлению движения

$$\theta \sim \frac{p_{\perp}}{p} \sim \frac{F_{\perp} \Delta t}{p}, \quad (3.3)$$

где  $F_{\perp} \sim (\partial U/\partial b) \sim U(b)/b$  — поперечная сила, ответственная за искривление траектории,  $\Delta t \sim b/v$  — характерное время взаимодействия и  $v$  — относительная скорость. Отсюда

$$\theta \sim \frac{\partial U}{\partial b} \frac{\Delta t}{p} \sim \frac{U(b)}{b} \frac{b}{pv} \sim \frac{U(b)}{pv} \sim \frac{U(b)}{E}. \quad (3.4)$$

С другой стороны, переходя на квантовый язык, неопределённость прицельного параметра  $\Delta b$  влечёт неопределённость поперечной компоненты импульса  $\Delta p_{\perp} \sim \hbar/\Delta b$ . Это эквивалентно неопределённости угла рассеяния

$$\Delta\theta \sim \frac{\Delta p_{\perp}}{p} \sim \frac{\hbar}{(\Delta b)p}. \quad (3.5)$$

Условия

$$\Delta\theta \ll \theta, \quad \Delta b \ll b \quad (3.6)$$

определяют пределы классического описания рассеяния:

$$\theta \gg \Delta\theta \sim \frac{\hbar}{p\Delta b} \gg \frac{\hbar}{pb} \rightsquigarrow \frac{U(b)}{E} \gg \frac{\hbar}{pb}. \quad (3.7)$$

Если потенциал  $U(b)$  убывает на больших расстояниях *быстрее*, чем кулоновский ( $\sim 1/b$ ), неравенство (3.7) нарушается на больших  $b$ . В этом случае малые углы рассеяния полностью определяются квантово-механической дифракцией. В чисто кулоновском случае рассеяния заряда  $e$  на центре с зарядом  $Ze$  угол рассеяния  $\theta \sim Ze^2/pvb$ , и условие классичности (3.7) выполняется для всех  $b$  при достаточно большой величине параметра Зоммерфельда:

$$\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v} \gg 1. \quad (3.8)$$

Обратное неравенство требуется для справедливости квантовомеханической теории возмущений (II.14.64).

### 3.2. Квазиклассическая амплитуда

Квазиклассическое приближение может работать, когда *много* парциальных волн дают заметный вклад в упругое сечение и дискретность квантованного орбитального момента становится менее существенной. Это возможно только при достаточно большой энергии. Для не слишком малых углов рассеяния можно ожидать, что квазиклассическое приближение будет

переходить в классическую теорию. Как обсуждалось выше, в (3.5), угол рассеяния  $\theta$  должен превышать  $\hbar/(pb) \sim 1/\ell$ , что эквивалентно требованию

$$\ell\theta \gg 1. \quad (3.9)$$

Поскольку полином Лежандра  $P_\ell(\cos \theta)$  имеет  $\ell$  нулей, область углов в (3.9) должна превышать угловой размер  $\sim 1/\ell$  между нулями, что ведёт к классическому усреднению. Квазиклассическое приближение может быть справедливо в широком интервале углов, а с некоторыми улучшениями может описать и дифракционные эффекты.

Квазиклассические фазы могут быть найдены путем прямого сравнения волновых функций для данного рассеивающего потенциала и для свободного движения. Эти фазы в классически разрешенной области за точкой поворота  $R_\ell$ , где классический импульс  $p_\ell(r)$  равен нулю, были найдены в (II.2.58):

$$\Phi_\ell(r) = \frac{1}{\hbar} \int_{R_\ell}^r dr p_\ell(r) + \frac{\pi}{4}. \quad (3.10)$$

Здесь

$$p_\ell(r) = \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\hbar^2(\ell + 1/2)^2}{r^2}} \quad (3.11)$$

и  $p_\ell(R_\ell) = 0$ . Квазиклассическая фаза  $\Phi_\ell^\circ$  для свободного движения даётся таким же выражением с  $U = 0$ ,

$$\Phi_\ell^\circ(r) = \frac{1}{\hbar} \int_{R_\ell^\circ}^r dr p_\ell^\circ(r) + \frac{\pi}{4}, \quad (3.12)$$

$$p_\ell^\circ(r) = \sqrt{2mE - \frac{\hbar^2(\ell + 1/2)^2}{r^2}}, \quad p_\ell^\circ(R_\ell^\circ) = 0. \quad (3.13)$$

Тогда парциальная фаза рассеяния равна

$$\delta_\ell = \left( \Phi_\ell - \Phi_\ell^\circ \right)_{r \rightarrow \infty}. \quad (3.14)$$

Фазы определяют амплитуду рассеяния

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) (e^{2i\delta_\ell} - 1). \quad (3.15)$$

Для углов  $\theta \neq 0$  та часть в (3.15), которая не содержит  $\exp(2i\delta_\ell)$ , исчезает (см. (II.1.146)), так что

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) e^{2i\delta_\ell}, \quad \theta \neq 0. \quad (3.16)$$

В квазиклассической области (3.9) полиномы Лежандра также могут быть представлены их квазиклассическим пределом (задача II.1.17):

$$P_\ell(\cos \theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \ell \sin \theta}} \sin[\theta(\ell + 1/2) + \pi/4]. \quad (3.17)$$

Окончательно квазиклассическая амплитуда рассеяния имеет вид

$$f(\theta) \approx \frac{1}{ik} \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta}} \sum_\ell \sqrt{\ell} e^{2i\delta_\ell} \sin[\theta(\ell + 1/2) + \pi/4]. \quad (3.18)$$

### 3.3. Квазиклассические фазы

Как всегда, в предельном переходе от квантового к классическому режиму существенный вклад в сумму в (3.18) дают много парциальных волн с большими  $\ell$ . Эти вклады деструктивно интерферируют, имея быстро меняющиеся фазы. В этом случае классическая траектория выделена условием стационарности фаз, см. разд. I.15.4: фазы должны слабо меняться между близкими значениями  $\ell$ .

Соседние парциальные волны складываются конструктивно, если

$$\frac{d}{d\ell} [2\delta_\ell \pm \theta(\ell + 1/2)] = 2 \frac{d\delta_\ell}{d\ell} \pm \theta = 0. \quad (3.19)$$

Точка поворота для свободного движения равна, в согласии с классической картиной,

$$R_\ell^\circ = \frac{\hbar(\ell + 1/2)}{\sqrt{2mE}} = \frac{\ell + 1/2}{k}, \quad (3.20)$$

и прямым интегрированием мы находим из (3.12), что при  $r \gg R_\ell^\circ$  фаза равна точному результату (II.2.80) для свободного движения:

$$\Phi_\ell^\circ(r) = kr - \frac{\ell\pi}{2}. \quad (3.21)$$

Правильный результат здесь обязан замене  $\ell(\ell + 1) \rightarrow (\ell + 1/2)^2$ , задача II.2.4.

Таким образом, парциальные фазы рассеяния в квазиклассическом приближении равны

$$\delta_\ell = \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{R_\ell}^r dr p_\ell(r) + \frac{\pi}{4} - kr + \frac{\ell\pi}{2} \right\}. \quad (3.22)$$

Члены, расходящиеся при  $r \rightarrow \infty$ , очевидно, сокращаются. Условие стационарности (3.19) даёт

$$-\int_{R_\ell}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \frac{\hbar(2\ell + 1)}{p_\ell(r)} + \pi \pm \theta = 0. \quad (3.23)$$

Вводя классические переменные — прицельный параметр  $b$  и скорость  $v$  на бесконечности

$$b = R_\ell^\circ = \frac{\hbar(\ell + 1/2)}{mv}, \quad v = \sqrt{\frac{2E}{m}}, \quad (3.24)$$

мы получаем из (3.23)

$$-2b \int_{R(b)}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \frac{1}{\sqrt{1 - (U(r)/E) - (b/r)^2}} \pm \theta = 0. \quad (3.25)$$

Это не что иное, как классическое уравнение [1, §18], определяющее угол рассеяния как функцию прицельного параметра.

### Задача 3.1

Найти квазиклассическую фазу предполагая, что потенциал  $U(r)$  быстро убывает как функция расстояния так, что он мал вблизи точки поворота данной парциальной волны.

#### Решение.

Разность фаз (3.14) может быть разложена до первого порядка по потенциалу

$$\delta_\ell \approx - \int_{R_\ell^\circ}^{\infty} dr U(r) \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dE} p_\ell^\circ(r) = - \frac{m}{\hbar^2} \int_{R_\ell^\circ}^{\infty} dr \frac{U(r)}{\sqrt{k^2 - (\ell + 1/2)^2/r^2}}. \quad (3.26)$$

Поскольку сходимость разложения по парциальным волнам определяется волнами с  $\ell \gg 1$ , для короткодействующих потенциалов можно вычислять фазы с помощью выражения (3.26). Можно показать [4, §123], что фазы (3.26) конечны, если потенциал  $U(r)$  убывает с расстоянием быстрее, чем кулоновский потенциал  $\sim 1/r$ ; полное сечение конечно для потенциалов, спадающих быстрее, чем  $1/r^2$ ; амплитуда рассеяния вперёд конечна для потенциалов, спадающих быстрее, чем  $1/r^3$ .

Согласно (3.26), при больших  $l$  имеем по порядку величины

$$\delta_\ell \approx - \frac{mU(R_\ell^\circ)R_\ell^\circ}{\hbar^2 k} \approx - \frac{mb}{k\hbar^2} U(b). \quad (3.27)$$

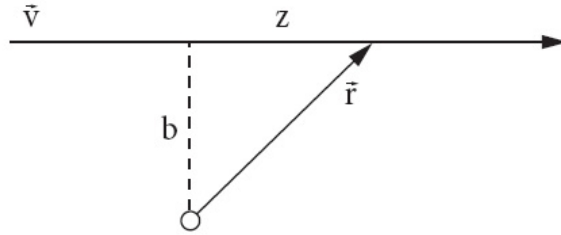


Рис. 3.1. Приближение прямолинейной траектории

Эта оценка может быть также переписана как

$$\delta_\ell \approx \frac{\tau}{\hbar} U(b), \quad (3.28)$$

где  $\tau \sim b/v$  — типичное *время соударения*. Чтобы сделать эту оценку более точной, заметим, что расстояние наибольшего сближения  $R_\ell^o$  при свободном движении совпадает с прицельным параметром  $b$ , и, используя координату  $z = \sqrt{r^2 - b^2}$  движения вдоль невозмущённой классической траектории, получаем из (3.26)

$$\delta(b) \approx -\frac{m}{k\hbar^2} \int_b^\infty dr \frac{U(r)}{\sqrt{1 - (b/r)^2}} = -\frac{m}{k\hbar^2} \int_b^\infty dz U(\sqrt{b^2 + z^2}). \quad (3.29)$$

Это приближение прямолинейной траектории (сравни с (1.104)) подразумевалось при выводе (3.26).

Теперь мы можем перейти к интегрированию по времени, полагая  $t = 0$  в момент наибольшего сближения; тогда  $z = vt = (\hbar k/m)t$ , и

$$\delta(b) \approx -\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dt U(\sqrt{b^2 + v^2 t^2}) = -\frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^\infty dt U(\sqrt{b^2 + v^2 t^2}), \quad (3.30)$$

в соответствии с оценкой (3.28). В этом приближении полный сдвиг фазы  $2\delta_\ell = 2\delta(b)$ ,  $b = (l + 1/2)/k$ , равен интегралу (делённому на  $\hbar$ ) от взаимодействия вдоль невозмущённой прямолинейной траектории. Приближение (3.26) справедливо только для слабых потенциалов, т. е. для *малых* углов рассеяния  $\theta \ll 1$  (прямая траектория), но достаточно больших  $\ell$ , так что  $\ell\theta > 1$ .

### Задача 3.2

Вывести (3.26) из борновского приближения (3.55).

**Решение.**

Удобно использовать цилиндрическую систему координат с осью  $z$  вдоль вектора  $\mathbf{k}' + \mathbf{k}$ , который ортогонален к  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ . Вектор  $\mathbf{r}$  имеет  $z$ -компоненту вдоль оси и  $\mathbf{b}$  в поперечной плоскости  $(xy)$ , тогда  $r^2 = z^2 + b^2$ . Если  $q = q_x$ , то

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = (\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) = qb \cos \varphi = 2kb \sin \frac{\theta}{2} \cos \varphi, \quad (3.31)$$

и борновская амплитуда принимает вид

$$f_B(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty b db \int_{-\infty}^\infty dz U(\sqrt{b^2 + z^2}) e^{-i2kb \sin(\theta/2) \cos \varphi}. \quad (3.32)$$

Интеграл по  $\varphi$  даёт функцию Бесселя

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i2kb \sin(\theta/2) \cos \varphi} = 2\pi J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (3.33)$$

Но для малых  $\theta$ , как следует из сравнения уравнения (II.1.155) с уравнением Бесселя,

$$J_0((\ell + 1/2)\theta) \approx P_\ell(\cos \theta). \quad (3.34)$$

С той же точностью  $2 \sin(\theta/2) \approx \theta$  и  $\ell + 1/2 = kb$ . Вводя  $\ell$  и  $r$  в качестве новых переменных интегрирования мы получаем

$$f_B(\theta) \approx -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \ell d\ell \int_{R_\ell^c}^\infty dr \frac{rU(r)}{\sqrt{r^2 - (\ell + 1/2)^2/k^2}} P_\ell(\cos \theta). \quad (3.35)$$

Это совпадает с точным парциально-волновым разложением, в котором фазы считаются малыми ( $\sin \delta_\ell \approx \delta_\ell$ ) и берутся из квазиклассики (3.26), а сумма по парциальным волнам заменена на интеграл,  $\sum_\ell (2\ell + 1) \rightarrow 2 \int \ell d\ell$ , поскольку в этом пределе много парциальных волн дают вклад.

**3.4. Связь с приближением эйконала**

Последняя задача указывает путь к улучшению приближения для того, чтобы учесть дифракционные эффекты и обеспечить выполнение оптической теоремы.

Как и раньше, мы предполагаем, что существенны вклады многих парциальных волн и что энергия велика по сравнению с потенциалом  $\bar{U}$ , имеющим

типичный радиус действия  $R$ ,

$$|\bar{U}| \ll E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mR^2} k^2 R^2 \sim \bar{K}(kR)^2. \quad (3.36)$$

Здесь условие применимости борновского приближения, разд. (1.11), может быть нарушено, но углы рассеяния малы, и мы можем использовать приближение (3.34), так что

$$f(\theta) \approx \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(e^{2i\delta_{\ell}} - 1) J_0(2kb_{\ell} \sin(\theta/2)), \quad kb_{\ell} = \ell + \frac{1}{2}. \quad (3.37)$$

Переходя от суммирования по  $\ell$  к интегрированию по прицельному параметру, находим

$$f(\theta) = -ik \int_0^{\infty} b db (e^{2i\delta(b)} - 1) J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (3.38)$$

Если бы мы сделали разложение для малых фаз,  $\exp[2i\delta(b)] \approx 1 + 2i\delta(b)$ , и взяли фазы вдоль прямой траектории (3.29), мы бы вернулись к борновскому приближению, (3.32-3.34).

*Эйконалное* приближение (приближение прицельного параметра), введённое ранее в разд. 1.12 путём прямого решения волнового уравнения, использует выражение (3.38) без разложения в показателе экспоненты. Записывая функцию Бесселя в (3.38) как интеграл (3.33), мы получаем выражение (1.100)

$$f(\theta) = -\frac{ik}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} b db (e^{2i\delta(b)} - 1) e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})}, \quad \mathbf{b} = (b \cos \varphi, b \sin \varphi, 0). \quad (3.39)$$

Здесь фазы  $\delta(b)$  могут быть вычислены согласно (3.29).

### Задача 3.3

Проверить, что амплитуда (3.39) удовлетворяет оптической теореме, см. разд. 1.8, для произвольных действительных фаз  $\delta(b)$ .

### Решение.

Действительно, полное упругое сечение после интегрирования  $|f|^2$  по  $d^2q$ , которое даёт двумерную дельта-функцию  $\delta^{(2)}(\mathbf{b} - \mathbf{b}')$ , равно

$$\sigma_{\text{el}} = \int d^2b 2[1 - \cos(2\delta(b))] = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0). \quad (3.40)$$

Эти результаты будут служить отправной точкой для рассмотрения дифракционного рассеяния. Они также могут быть обобщены на нецентрального поле. Метод работает также и в присутствии неупругих каналов, но с комплексными фазами  $\delta(b)$ , когда  $|S_\ell| = |\exp[2i\delta(b)]| < 1$ .

### 3.5. Дифракционное рассеяние

Наличие неупругих процессов может быть первоначально обнаружено как *поглощение*, влияющее на упругое рассеяние. Мы уже видели, см. разд. 1.2, что поглощение и упругое рассеяние определяются одними и теми же параметрами, элементами  $S$ -матрицы. Поглощение обрезает или уменьшает некоторые части фронта волны. Тем самым упруго рассеянная волна неизбежно искажена. Искаженная волна теперь не плоская волна, она содержит Фурье-компоненты с волновыми векторами, отличными от волновых векторов падающего пучка.

Дополнительное рассеяние с длиной волны  $\lambda$ , малой по сравнению с радиусом  $R$  потенциала, аналогично дифракции света на препятствии. Квантовая теория дифракционного рассеяния практически совпадает с описанием дифракции параллельного коротковолнового пучка, идущего от удаленного источника (*дифракция Фраунгофера*, [3, §61]). Многие формулы могут быть непосредственно взяты из оптики.

Одно из типичных приложений дифракционной картины можно найти в задаче рассеяния достаточно быстрых частиц на ядрах. Условие  $\lambda < R$ , где  $R$  размер ядра, выполняется для нейтронов с энергией выше, чем несколько МэВ. Строго говоря, квантовая система, такая, как атомное ядро, не имеет четкой границы. В более точном рассмотрении нужно учитывать плавное поведение ядерной плотности, которая уменьшается от среднего значения в центре до нуля снаружи.

Сделаем простые оценки для быстрых нейтронов, взаимодействующих с тяжелым ядром. Если размер системы гораздо больше, чем длина волны нейтронов, то нейтроны чувствуют отдельные составляющие внутри ядра. Благодаря этому мы можем использовать понятие многократных столкновений в среде. *Длина свободного пробега* нейтронов в ядерной материи оценивается как

$$\Lambda \approx \frac{1}{n\sigma}, \quad (3.41)$$

где  $n$  есть плотность частиц в ядерной среде ( $\sim 10^{38} \text{см}^{-3}$  для плотности в центре тяжёлого ядра), а  $\sigma$  — типичное сечение рассеяния, для которого мы можем взять экспериментальное сечения рассеяния свободных нуклонов с

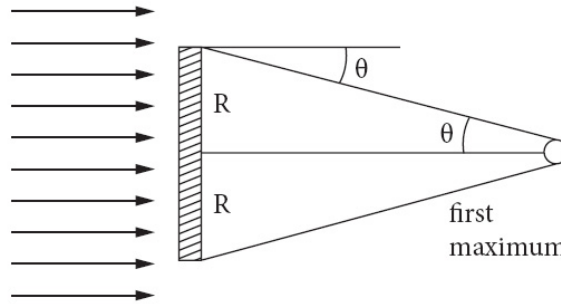


Рис. 3.2. Дифракционная картина на чёрном диске

кинетической энергией в системе центра масс порядка нескольких десятков МэВ,  $\sigma \approx 0,5$  барн ( $1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$ ). Отсюда мы находим  $\Lambda \approx 2 \cdot 10^{-14} \text{ см}$ . Ядерная плотность, грубо говоря, не зависит от массового числа  $A$ , поскольку тяжёлое ядро подобно капле несжимаемой жидкости, объём которой  $V$  пропорционален  $A$  и для сферического ядра

$$V = \frac{4}{3} \pi R^3 \quad \rightsquigarrow \quad R = r_0 A^{1/3}, \quad r_0 \approx 1,2 \text{ ф.} \quad (3.42)$$

Так как даже для относительно легких ядер мы имеем  $\Lambda \ll R$ , то вероятность для нуклона пройти ядро без столкновения ничтожно мала,  $\sim 10^{-8}$ . Поэтому естественно принять, что в этой области энергий ядро ведёт себя как *чёрная сфера*, которая поглощает (удаляет из падающего пучка) все частицы, попадающие внутрь прицельного параметра  $b \sim R$ .

Мы пришли к задаче о дифракции коротких волн,  $kR \gg 1$ , на чёрной сфере. Если мы смотрим на упруго рассеянные частицы, мы видим небольшие отклонения от классических траекторий, соответствующих геометрической оптике. Однако в отличие от оптики, где наблюдаемые эффекты действительно малы для малых углов дифракции Фраунгофера, в ядерной физике они полностью определяют экспериментальную картину. Например, рассмотрим дифракцию на черном диске радиусом  $R$  (рис. 3.2). Дифракционный угол  $\vartheta$ , который определяется из условия  $\bar{\lambda} \sim R \sin \vartheta$ , при наших условиях мал,  $\vartheta \sim \bar{\lambda}/R \ll 1$ . Сразу позади диска мы видим геометрическую *тень*. Дифракционная картина начинается только на расстоянии первого максимума, которое порядка

$$R \cot \vartheta \sim \frac{R}{\vartheta} \sim \frac{R^2}{\lambda} \gg R. \quad (3.43)$$

Мы уже видели (задача 1.3), что это расстояние определяет возможность асимптотического разделения падающей и рассеянной волн, которое необходимо для разложения по парциальным волнам. В оптике мы имеем  $\bar{\lambda} \sim 10^{-5}$  см,  $R \sim 1$  см,  $R^2/\bar{\lambda} \sim 1$  км, в то время как наблюдение ведётся на расстоянии  $r \ll R^2/\bar{\lambda}$ . В противоположность этому в ядерной физике  $R \leq 10^{-12}$  см,  $\bar{\lambda} \geq 10^{-(13 \div 14)}$  см,  $R^2/\bar{\lambda} \sim 10^{-(10 \div 11)}$  м, в то время как наблюдение ведётся на макроскопических расстояниях  $r \gg R^2/\bar{\lambda}$ .

### 3.6. Дифракция на чёрной сфере

В коротковолновом пределе, который мы здесь рассматриваем, в сечение дают вклад много парциальных волн. Сечение поглощения

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(1 - |S_{\ell}|^2) \quad (3.44)$$

выражается через *коэффициенты прилипания*

$$\zeta_{\ell} = 1 - |S_{\ell}|^2, \quad 0 \leq \zeta_{\ell} \leq 1. \quad (3.45)$$

Полученное выражение

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)\zeta_{\ell} \quad (3.46)$$

имеет простой смысл: вклад парциальной волны есть вероятность захвата частицы (дефицит унитарности  $S$ -матрицы для данного  $\ell$ ,  $\zeta_{\ell}$ ), умноженный на соответствующую площадь  $\pi(b_{\ell+1}^2 - b_{\ell}^2) = (\pi/k^2)(2\ell + 1)$ .

Коэффициенты прилипания  $\zeta_{\ell}$  определяют *степень черноты* рассеивателя. Для абсолютно чёрного препятствия все частицы поглощаются, как только попадают в площадь препятствия:

$$\zeta_{\ell} = \begin{cases} 1, & b < R, \quad \text{i.e. } \ell \leq kR; \\ 0, & b > R, \quad \text{i.e. } \ell > kR. \end{cases} \quad (3.47)$$

Тогда элементы  $S$ -матрицы равны

$$S_{\ell} = e^{2i\delta(b_{\ell})} = \begin{cases} 0, & \ell \leq kR; \\ 1, & \ell > kR, \end{cases} \quad (3.48)$$

и интегрирование в *упругой* амплитуде (3.38) обрезается на радиусе сферы:

$$f(\theta) = ik \int_0^R db b J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (3.49)$$

Необходимо подчеркнуть опять, что всё рассмотрение законно только в коротковолновом пределе, когда небольшая ошибка в предельном прицельном параметре не играет роли из-за многих парциальных волн, дающих вклад в сечение.

Интегрирование в (3.49) даёт

$$f(\theta) = i \frac{R}{2 \sin(\theta/2)} J_1(2kR \sin(\theta/2)), \quad (3.50)$$

и мы находим дифференциальное упругое сечение

$$\frac{d\sigma}{do} = R^2 \frac{J_1^2(2kR \sin(\theta/2))}{4 \sin^2(\theta/2)} \equiv k^2 R^4 \frac{J_1^2(x)}{x^2}, \quad x = 2kR \sin(\theta/2). \quad (3.51)$$

При больших  $x$ ,  $x \gg 1$ , функция Бесселя имеет асимптотику

$$J_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right), \quad (3.52)$$

так что для достаточно больших углов рассеяния  $2 \sin(\theta/2) \gg (1/kR) = \bar{\lambda}/R$  сечение (3.51) падает как  $\sim 1/x^3$ . Это в точности утверждение, что дифракционные углы малы:

$$2 \sin(\theta/2) \approx \theta \leq \frac{1}{kR} = \frac{\bar{\lambda}}{R} \ll 1. \quad (3.53)$$

В этом режиме

$$\frac{d\sigma}{do} \approx R^2 \frac{J_1^2(kR\theta)}{\theta^2}, \quad (3.54)$$

в то время как для очень малых углов  $\theta \ll 1/kR$  мы имеем  $J_1(x) \rightarrow x/2$ , и сечение стремится к предельному значению

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{d\sigma}{do} = \frac{k^2 R^4}{4} = (kR)^2 \frac{R^2}{4}. \quad (3.55)$$

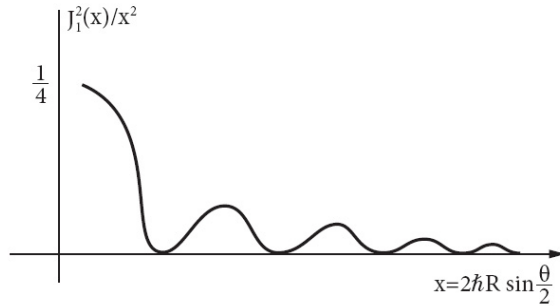


Рис. 3.3. Угловое распределение для чёрного диска

Угловое распределение (рис. 3.3) демонстрирует характерные особенности дифракционного рассеяния. Сечение имеет острый пик вперёд,  $\theta < 1/kR$ ; при больших углах присутствуют вторичные максимумы с периодичностью по углу, определяемой фактором  $kR$ . Интенсивность вторичных максимумов быстро убывает  $\sim 1/\theta^3$ .

Полное упругое сечение

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\theta \frac{d\sigma}{d\theta} = 2\pi R^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{J_1^2(2kR \sin(\theta/2))}{4 \sin^2(\theta/2)}, \quad (3.56)$$

можно вычислить с достаточной точностью положив верхний предел интегрирования равным бесконечности, поскольку в любом случае главный вклад дают малые углы. Тогда мы получаем

$$\sigma_{\text{el}} \approx 2\pi R^2 \int_0^\pi d\theta \theta \frac{J_1^2(kR\theta)}{\theta^2} \approx 2\pi R^2 \int_0^\infty dx \frac{J_1^2(x)}{x} = \pi R^2. \quad (3.57)$$

Как и в классической теории, в этом дифракционном пределе упругое сечение равно геометрическому сечению чёрной сферы.

#### Задача 3.4

Показать, что в пределе (3.53) сечение поглощения (3.46) также равно этому классическому результату

$$\sigma_{\text{inel}} = \pi(R + \bar{\lambda})^2 \approx \pi R^2 = \sigma_{\text{el}}, \quad (3.58)$$

и проверить, что выполняется оптическая теорема.

### 3.7. Оптическая модель

Обычно среда не может считаться абсолютно чёрной (как предполагалось выше). Например, если бы сложные ядра были чёрными, сечения (3.57) и (3.58) росли бы монотонно с массовым числом  $\propto R^2 \propto A^{2/3}$  и не зависели бы от энергии в пределе  $kR \gg 1$ . Эксперименты противоречат такому предположению; угловые распределения рассеянных нейтронов также отличаются от предсказаний чисто дифракционной модели.

Во многих случаях лучше рассматривать мишень как *серую* или полупрозрачную. Дифракционное рассеяние в таких случаях может быть описано *оптической моделью* путём введения *комплексного потенциала*. Параметры оптического потенциала трудно рассчитать теоретически. Как правило, эти параметры устанавливаются эмпирически и зависят от энергии рассеивающихся частиц. Для нейтронов, рассеивающихся на ядрах, мнимая часть оптического потенциала невелика,  $\text{Im } U \approx 5 - 6$  МэВ при энергии  $E \sim 10$  МэВ, в то время как действительная часть потенциала (глубина эффективной потенциальной ямы) порядка 40-50 МэВ.

Оценим длину свободного пробега нейтрона  $\Lambda$  в такой среде. Поскольку  $kR > 1$ , можно пренебречь кривизной ядерной поверхности и провести оценку для нейтрона, пересекающего плоскую границу между двумя средами. Внутри поглощающего ядра волновой вектор нейтрона является комплексным,  $\mathbf{K} = \mathbf{K}_1 + i\mathbf{K}_2$ , и волновая функция спадает внутри ядра,

$$\psi(\mathbf{r}) \propto e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})} = e^{-(\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r}) + i(\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{r})}. \quad (3.59)$$

Комплексный волновой вектор выражается через комплексный потенциал

$$\hbar K = \sqrt{2m(E - U)}, \quad U = -U_1 - iU_2, \quad (3.60)$$

где  $U_1 > 0$  (ядерное притяжение) и  $U_2 > 0$  (затухание волны).

Если, согласно приведённым выше цифрам,  $U_2$  значительно меньше, чем  $U_1$ , мы получаем приближённые выражения:

$$K_1 = \text{Re } K \approx \sqrt{\frac{2m(E + U_1)}{\hbar^2}} = k \sqrt{1 + \frac{U_1}{E}}, \quad (3.61)$$

$$K_2 = \text{Im } K \approx \frac{2mU_2}{2\hbar \sqrt{2m(E + U_1)}} = k \frac{U_2}{E} \frac{1}{1 + U_1/E}. \quad (3.62)$$

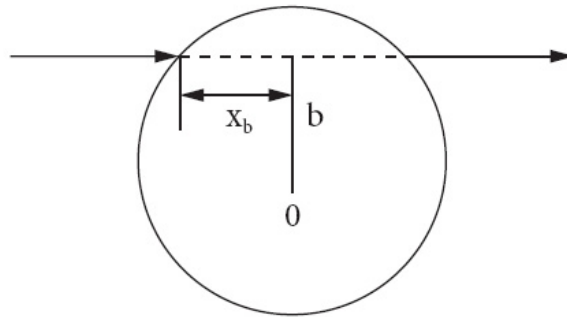


Рис. 3.4. Рассеяние быстрой частицы на сером шаре

Интенсивность волны (3.59) падает экспоненциально,

$$|\psi|^2 \propto e^{-2(\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r})}, \quad (3.63)$$

и длина свободного пробега может быть оценена как

$$\Lambda \approx \frac{1}{2K_2} = \frac{1}{2k} \frac{E}{U_2} \sqrt{1 + \frac{U_1}{E}}. \quad (3.64)$$

Для упомянутых выше значений  $U_1, U_2$  и  $E$  находим  $\Lambda \approx 0,6 \cdot 10^{-12}$  см, т. е. значительно больше, чем наша предыдущая оценка (3.41). Как мы увидим далее, из-за принципа Паули внутренние столкновения подавлены, поскольку многие доступные конечные состояния уже заняты нуклонами, и фазовый объём разрешенных конечных состояний сильно уменьшается.

Используя оптическую аналогию, мы можем ввести комплексный *показатель преломления* серой среды

$$n = n_1 + in_2 = \frac{K}{k} = \frac{K_1 + iK_2}{k}. \quad (3.65)$$

Предположим для простоты, что ядерный потенциал  $U$  моделируется сферической ямой радиуса  $R$ . Быстрые нейтроны с  $kR \gg 1$  не чувствуют кривизны поверхности. Пусть  $2x_\ell$  — длина пути, пересекаемого в ядре быстрым нейтроном с орбитальным моментом  $\ell$  (прицельный параметр  $b = \ell/k$ ), рис. 3.4. Прощедшая волна отличается от падающей на фазу

$$\Delta\varphi = (K_1 - k)2x_\ell = k(n_1 - 1)2x_\ell \quad (3.66)$$

и подавлена по амплитуде на фактор  $\exp(-K_2 \cdot 2x_\ell) = \exp(-2n_2 k x_\ell)$ . Так же как в (3.48), мы находим элементы  $S$ -матрицы,

$$S_\ell = \begin{cases} \exp\{-2x_\ell[n_2 - i(n_1 - 1)]k\}, & \ell \leq kR; \\ 1, & \ell > kR. \end{cases} \quad (3.67)$$

Как и раньше, главный вклад в рассеяние идёт от больших значений  $\ell$  и малых углов рассеяния. Общее выражение (3.38) даёт ( $x(b) = \sqrt{R^2 - b^2}$ ):

$$f(\theta) = ik \int_0^R b db \left(1 - e^{-2kx(b)[n_2 - i(n_1 - 1)]}\right) J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (3.68)$$

### Задача 3.5

Вычислить упругое рассеяние и сечение поглощения.

#### Решение.

Интегрирование по углам даёт

$$\sigma_{\text{el}} = 2\pi \int_0^R b db \left|1 - e^{-2k\sqrt{R^2 - b^2}[n_2 - i(n_1 - 1)]}\right|^2, \quad (3.69)$$

$$\sigma_{\text{inel}} = 2\pi \int_0^R b db \left[1 - e^{-4n_2 k \sqrt{R^2 - b^2}}\right]. \quad (3.70)$$

После следующего интегрирования по  $x$  с  $x dx = b db$  мы получаем, например, для сечения поглощения

$$\sigma_{\text{inel}} = \pi R^2 + 2\pi \frac{e^{-\alpha R}(1 + \alpha R) - 1}{\alpha^2}, \quad \alpha = 4n_2 k. \quad (3.71)$$

В пределе слабого поглощения  $\alpha R \ll 1$  результат пропорционален объёму:

$$\sigma_{\text{inel}} \approx \frac{2\pi}{3} \alpha R^3 = \frac{\alpha}{2} V. \quad (3.72)$$

В практических вычислениях нужно учитывать диффузность ядерной границы, разницу в формах действительной и мнимой частей оптического потенциала (поглощение сильнее вблизи поверхности), спин-орбитальное взаимодействие и т.д. Гипотеза о резкой границе переоценивает отношение  $\sigma_{\text{el}}/\sigma_{\text{inel}}$  из-за усиленного отражения от скачка показателя преломления. Введение плавного изменения оптического потенциала уменьшает это отношение в согласии с наблюдениями аналогично *просветлённой оптике*.

Новые аспекты возникают в приложениях оптической модели к *заряженным* частицам. Здесь рассеяние аналогично дифракции света на сфере с показателем преломления  $n \propto (1 - \text{const}/r)$ , преломление отклоняет лучи от сферы и искажает область тени.

### 3.8. Многократное рассеяние в среде

Здесь мы кратко коснемся очень важного приложения — рассеяния частицы в среде, которая содержит множество рассеивателей. Мы предполагаем хаотическое распределение этих центров, например, атомов в жидкости или примесей в неупорядоченных твердых веществах. Типичное применение можно найти в нейтронной физике; в конденсированных средах длина волны медленных нейтронов может быть порядка межатомных расстояний, а в газах это расстояние превышает длину волны.

Рассмотрим случай короткодействующих потенциалов, когда сила действует только на расстоянии, малом по сравнению со средним расстоянием между рассеивателями. Вследствие многократного рассеяния, интерференция волн, рассеянных от различных центров, и волны, рассеянной вперед, с падающей волной приводит к отражению и преломлению сигнала, проходящего через среду. Мы начнем с рассеяния плоской волны  $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$  на одном центре, расположенном в начале координат. Обратное фурье-преобразование выражения (1.74) определяет

$$U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \int d^3k' \frac{1}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}. \quad (3.73)$$

Отметим, что правая часть уравнения (3.73) содержит интегрирование по всем векторам  $\mathbf{k}'$ , в то время как амплитуда упругого рассеяния определена только на энергетической поверхности  $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$ . Поэтому (3.73) есть фактически определение амплитуды *вне массовой поверхности*, которая совпадает с обычной упругой амплитудой на энергетической поверхности. Сравнение (3.73) с уравнением Шрёдингера даёт

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi^2} \int d^3k' f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}. \quad (3.74)$$

#### Задача 3.6

Вывести уравнение, аналогичное (3.74), для волновой функции  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0)$ , которая описывает рассеяние плоской волны с волновым вектором  $\mathbf{k}$  центром, расположенным в точке  $\mathbf{r}_0$ .

**Решение.**

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) = -\frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0)}}{2\pi^2} \int d^3k' f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}. \quad (3.75)$$

Правая часть уравнения (3.75) описывает однократное действие оператора рассеяния, локализованного в точке  $\mathbf{r}_0$ :

$$\hat{f}(\mathbf{r}_0) \Rightarrow f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_0}. \quad (3.76)$$

Переходя к системе  $N$  рассеивателей, расположенных в точках  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ , мы должны найти конечную волновую функцию  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \{\mathbf{r}_i\})$  после многократного рассеяния падающей волны с волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Для данного рассеивателя в точке  $\mathbf{r}_a$ , эффективной падающей волной, вместо плоской волны в (3.76), является функция  $\psi_{\mathbf{k}}^{(a)}(\mathbf{r}; \{\mathbf{r}_i\})$ , которая учитывает присутствие всех других рассеивателей. После суммирования волн, рассеянных на всех центрах, мы получаем вместо (3.75) и (3.76),

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = -\frac{1}{2\pi^2} \int d^3k' f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \sum_a e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_a} \psi_{\mathbf{k}'}^{(a)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (3.77)$$

При наличии многих центров рассеивания влияние любого из них на процесс рассеяния мало  $\sim 1/N$ . В сумме по  $a$  в (3.77), в хорошем приближении можно заменить функцию  $\psi_{\mathbf{k}}^{(a)}$  на полную волновую функцию  $\psi_{\mathbf{k}}$ . После этого мы можем усреднить (3.77) по всему хаотическому распределению центров в объёме  $V$  с ограничением, что их средняя плотность  $\rho = N/V$  фиксирована. В предположении короткодействующих сил рассеяние на данном центре не зависит от точного положения других центров, так что в правой части (3.77) можно усреднять фазу экспоненты и волновую функцию  $\psi$  независимо. Усреднённая функция  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  подчиняется тогда уравнению

$$(\nabla^2 + k^2)\overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})} = -\frac{1}{2\pi^2} \sum_a \overline{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_a} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})}. \quad (3.78)$$

Суммирование по рассеивателям и усреднение по их положениям может быть заменено на интегрирование по объёму со средней плотностью:

$$\sum_a \overline{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_a}} \Rightarrow \int d^3r \rho e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = \rho(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \quad (3.79)$$

Таким образом, для хаотически расположенных центров влияние среды сводится к компенсации в среднем всех волн за исключением той, которая рассеивается вперёд, на нулевой угол. Тогда остаётся только амплитуда  $f(0) = f(\mathbf{k}, \mathbf{k})$ , мы возвращаемся опять на энергетическую поверхность и находим

$$(\nabla^2 + k^2)\overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})} = -4\pi\rho f(0)\overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}. \quad (3.80)$$

Видно, что усреднённое действие неупорядоченной среды сводится к эффективному изменению волнового вектора волны

$$k^2 \Rightarrow K^2 = k^2 + 4\pi\rho f(0). \quad (3.81)$$

Эффективный показатель преломления среды

$$n = \frac{K}{k} = \sqrt{1 + \frac{4\pi\rho f(0)}{k^2}} \quad (3.82)$$

определяется в этом приближении только плотностью среды и амплитудой рассеяния вперёд на одном центре. Детали структуры вещества несущественны. В присутствии нескольких сортов  $s$  рассеивателей усреднённая амплитуда в (3.82) будет содержать  $\sum_s \rho_s f_s(0)$ . Во многих практических случаях отличие показателя преломления (3.82) от вакуумного значения  $n = 1$  мало, и можно пользоваться приближённым выражением

$$n \approx 1 + \frac{2\pi\rho f(0)}{k^2}. \quad (3.83)$$

Согласно (3.81), среда эквивалентна потенциальной яме глубиной

$$U = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - K^2) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho f(0). \quad (3.84)$$

Этот потенциал комплексный и содержит часть, отвечающую поглощению,

$$U_2 \equiv \text{Im } U = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho \text{Im } f(0), \quad (3.85)$$

которая, в силу оптической теоремы (1.58), может быть выражена через полное сечение

$$U_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho k\sigma = -\frac{\hbar}{2}\rho v\sigma. \quad (3.86)$$

Этот результат согласуется с использованными выше элементарными оценками, основанными на длине свободного пробега  $\Lambda$  частицы в среде. Дей-

ствительно, волновая функция в статистически однородной среде экспоненциально затухает

$$\Psi \propto e^{-(i/\hbar)U_2 t} = e^{-\rho v \sigma t/2}, \quad (3.87)$$

и мы получаем для интенсивности пучка

$$|\Psi|^2 \propto e^{-\rho v \sigma t} = e^{-t/\tau}, \quad (3.88)$$

где время свободного пробега равно

$$\tau = \frac{1}{\rho v \sigma} = \frac{\Lambda}{v}, \quad \Lambda = \frac{1}{\rho \sigma}. \quad (3.89)$$

Если применимо борновское приближение (1.79), действительная часть оптического потенциала (3.84) описывается простым выражением

$$U_1 \equiv \text{Re } U = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \rho \left( -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \int d^3r U(\mathbf{r}) = \rho \int d^3r U(\mathbf{r}). \quad (3.90)$$

Это просто результат суммарного действия всех рассеивающих центров,  $\sum_a U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$ , усреднённый, как и в (3.79), по их пространственному распределению с данной плотностью  $\rho = N/V$ .

### Задача 3.7

Найти критический угол полного отражения медленных нейтронов от поверхности ферромагнетика с внутренним полем  $\mathcal{B}$ . Пренебречь поглощением и считать, что взаимодействие нейтронов с ядрами вещества слабое и может характеризоваться положительной длиной рассеяния  $a$  из (2.64). (Более простая версия вопроса предлагалась в задаче I.2.3.)

### Решение.

Амплитуда рассеяния вперёд  $f(0) = -a < 0$ , так что среда менее плотная для нейтронов, чем вакуум, и показатель преломления меньше единицы:

$$n \approx 1 - \frac{2\pi\rho a}{k^2}. \quad (3.91)$$

Даже для медленных нейтронов с  $\lambda \sim 1$  нм и  $a \sim 10^{-13}$  см  $\sim 10^{-6}$  нм отрицательный член в (3.91) мал, так что использование приближения (3.91) оправдано. Ещё нужно добавить эффект магнитного взаимодействия спина  $\pm\mu\mathcal{B}$  для двух спиновых состояний, где  $\mu$  — магнитный момент нейтрона.

Как результат, появляется двойное лучепреломление нейтронного пучка

$$n(\mathcal{B}) \approx 1 - \frac{1}{k^2} \left( 2\pi\rho a \pm \frac{m}{\hbar^2} \mu\mathcal{B} \right). \quad (3.92)$$

Критический угол полного отражения  $\vartheta_c$  определяется из

$$n = \cos \vartheta_c \approx 1 - \frac{\vartheta_c^2}{2}. \quad (3.93)$$

Из (3.92) мы получаем

$$\vartheta_c = \sqrt{2[1 - n(\mathcal{B})]} = \frac{1}{k} \sqrt{4\pi\rho a \pm \frac{2m}{\hbar^2} \mu\mathcal{B}}. \quad (3.94)$$

Этот угол меньше  $1^\circ$  для тепловых нейтронов с  $E_n = 0,025$  эВ. Если магнитный член в (3.94) превышает ядерный, нейтроны с одной проекцией спина будут отражаться, и все отражённые нейтроны будут поляризованы; ср. с задачей I.2.3.

### 3.9. Когерентное рассеяние на кристаллах

Как следует из уравнений (3.76) и (3.77), амплитуда рассеяния в среде существенно отличается от амплитуды рассеяния на одном центре наличием *структурного фактора*:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \Rightarrow f(\mathbf{k}', \mathbf{k})F(\mathbf{q}), \quad F(\mathbf{q}) = \sum_a e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}. \quad (3.95)$$

После пространственного усреднения (3.79) в *неупорядоченной* среде остаётся только рассеяние вперёд  $\mathbf{q} = 0$ , когда все центры рассеивают в фазе. Конечная амплитуда пропорциональна числу  $N$  центров; сечение в этом случае пропорционально  $N^2$ . В *кристаллах* суммирование по регулярно расположенным узлам отбирает определённые ненулевые векторы  $\mathbf{q}$ , которые отвечают *когерентному* рассеянию на многих атомах. Это происходит, когда  $\mathbf{q} = \mathbf{K}_j$  — одному из векторов обратной решётки, см. разд. I.8.52. Для любого из них все вклады в сумму  $F(\mathbf{q})$  равны 1. При упругом рассеянии  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ , когда

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_j; \quad (3.96)$$

это называется *условием Брэгга*. Этот результат согласуется с фактом, установленным в гл. I.8: регулярная решётка создаёт потенциал, имеющий

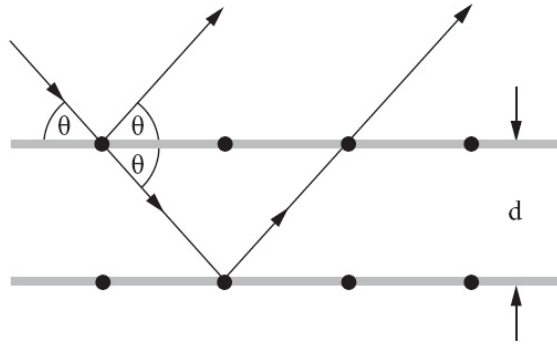


Рис. 3.5. Геометрия брэгговского рассеяния

ненулевые фурье-компоненты только при импульсах, совпадающих с векторами обратной решётки. По этой причине плоская волна не является стационарным состоянием внутри кристалла. Рассеяние на периодическом потенциале добавляет компоненты с импульсами, отличающимися от начального на один из векторов  $\mathbf{K}_j$ .

Смысл условий Брэгга ясен из геометрических соображений; это очень похоже на рассеяние рентгеновских лучей, обсуждавшееся в разд. П.15.12. Эти условия выглядят так:

$$k'^2 = k^2, \quad \mathbf{K}^2 = -2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{K}). \quad (3.97)$$

Данные уравнения определяют (для различных  $\mathbf{K}$ ) плоскости в  $\mathbf{k}$ -пространстве. В терминах угла рассеяния  $\vartheta$

$$K^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}. \quad (3.98)$$

Если  $\{\mathbf{r}_i\}$  — множество пространственных точек, удовлетворяющих условию

$$(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i) = 2\pi n, \quad n = \text{integer}, \quad (3.99)$$

то эти точки определяют для различных  $n$  семейство параллельных плоскостей. Согласно определению обратной решётки (I.8.52), эти плоскости проходят через узлы прямой решётки. Пусть расстояние между соседними плоскостями (3.99) равно  $d$ . Тогда длина вектора  $\mathbf{K}$ , который определяет это семейство, может быть записана как  $K = 2\pi n/d$ , и из (3.98) мы находим

(ср. с аналогичным условием (30.95) для рентгеновских лучей)

$$n\lambda = \frac{2\pi}{k} n = 2d \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad (3.100)$$

где  $\lambda$  — длина волны частицы. Это обычная форма записи условия Брэгга, которое определяет направления интерференционных максимумов в когерентном отражении волны от системы кристаллических плоскостей. Только векторы обратной решётки, удовлетворяющие условию  $K < k/\pi$ , или, для длин волн,  $\lambda \leq 2d$ , могут давать вклад в брэгговское рассеяние. Нейтроны с  $\lambda > 2d$  проходят кристалл без заметного рассеяния.

### Задача 3.8

Рассмотрим молекулу, состоящую из  $N$  регулярно расположенных одинаковых тяжёлых атомов. Предполагая применимость борновского приближения, найти сечение упругого рассеяния частицы массы  $m$  на молекуле, если известна амплитуда рассеяния  $f(\mathbf{q})$  на одном атоме. Укажите условия когерентного рассеяния, когда сечение усиливается фактором  $N^2$  по сравнению с рассеянием на одном атоме. Рассмотрите

- a.) два атома на расстоянии  $d$ ;
- b.) четыре атома по углам квадрата;
- c.) линейную цепочку  $N$  атомов, расположенных вдоль оси  $x$  в точках  $a, 2a, \dots, Na$ . Здесь полезна формула суммирования геометрической прогрессии

$$\sum_{n=0}^N z^n = \frac{1 - z^{N+1}}{1 - z}. \quad (3.101)$$

Дополнительная литература: [3], [4], [12], [13], [16], [17].



... летящая стрела находится в покое, что следует из предположения, что время состоит из мгновений (третий парадокс Зенона Элейского)

*Аристотель. «Физика»*

## Глава 4

### Реакции, распады и резонансы

#### 4.1. Каналы реакции

Бинарная реакция



есть обобщение процесса рассеяния на случай, когда конечные частицы могут отличаться от начальных. В ядерных реакциях используется также обозначение  $A(a, b)B$ , где  $A$  — ядро мишени,  $B$  — ядро продукта реакции, а  $a$  и  $b$  — налетающая и вылетающая частицы. Обычно подразумевается, что ядро мишени покоится, а частицы  $a$  формируют падающий пучок. Частицы в середине обозначения,  $(a, b)$ , это те, которые регистрируются детекторами. В современных экспериментах с короткоживущими ядрами  $A$  может использоваться *обратная кинематика*, когда эти ядра образуют начальный пучок.

Мы характеризуем реакцию, указывая, какие частицы находятся в *свободном движении* до и после взаимодействия (в *асимптотических* квантовых состояниях) и могут быть зарегистрированы детекторами. Каждый возможный набор частиц вместе со всеми квантовыми числами, описывающими их внутренние состояния (например, спин), образуют *канал* реакции. В вышеприведённых обозначениях канал  $a \equiv (A + a)$  — это *входной* канал, а канал  $b \equiv (B + b)$  — *выходной* канал. Для каждого *открытого* (разрешённого по имеющейся энергии, см. ниже) канала в принципе возможна постановка экспериментов, в которых этот канал может быть как входным, так и выходным.

Если входной канал и выходной канал совпадают, то мы говорим об *упругом* процессе, в противном случае реакция *неупругая*. Ранее мы учитывали существование различных неупругих каналов как *поглощение*, приводящее

к уходу частиц из упругого канала. Конкретные неупругие каналы рассматривались только в рамках борновского приближения (теории возмущений). Здесь мы познакомимся несколько ближе с физикой реакций. Конечно, реакции более сложные, чем бинарные, также возможны.

Рассматривая все реакции в системе центра масс, мы можем записать полную энергию в канале  $a$  как сумму

$$E_a = \varepsilon_a + E_a^{\text{intr}} \quad (4.2)$$

кинетической энергии относительного движения  $\varepsilon_a = \mathbf{p}^2/2\mu_a$ , где  $\mathbf{p}_a$  есть относительный импульс,  $\mu_a = m_a m_A / (m_a + m_A)$  приведённая масса в этом канале и  $E_a^{\text{intr}}$  — это внутренняя энергия частиц  $a$  и  $A$ . Мы не рассматриваем здесь обобщение на релятивистскую кинематику [18]. В реакции  $a \rightarrow b$  сохраняется полная энергия  $E$ :

$$E_a = \varepsilon_a + E_a^{\text{intr}} = \varepsilon_b + E_b^{\text{intr}} = E_b \equiv E. \quad (4.3)$$

Изменение кинетической энергии в процессе носит название *тепловой эффект* реакции или её *Q-value*

$$Q_{ba} = \varepsilon_b - \varepsilon_a = E_a^{\text{intr}} - E_b^{\text{intr}}. \quad (4.4)$$

Эта величина полностью определяется внутренней структурой реагентов.

Реакции  $a \rightarrow b$  с  $Q_{ba} > 0$  называются *экзотермическими*. Они энергетически возможны при любой начальной кинетической энергии  $\varepsilon_a$  (выигрыш в кинетической энергии за счёт внутренней энергии). *Эндотермические* реакции,  $Q_{ba} < 0$ , сопровождаются потерей кинетической энергии. Они возможны, только если  $\varepsilon_a + Q_{ba} > 0$ , поскольку всегда должно быть  $\varepsilon_b \geq 0$ . Тогда необходимо, чтобы  $\varepsilon_a \geq -Q_{ba} > 0$ . Это значит, что существует положительная *пороговая* энергия

$$\varepsilon_{a \rightarrow b}^{\text{th}} = -Q_{ba} = E_b^{\text{intr}} - E_a^{\text{intr}} > 0 \quad (4.5)$$

и реакция  $a \rightarrow b$  возможна только выше этого порога, когда  $\varepsilon_a > \varepsilon_{a \rightarrow b}^{\text{th}}$ . Величина полной энергии, при которой канал  $b$  становится активным,

$$E = E_b^{\text{intr}} = \varepsilon_{a \rightarrow b}^{\text{th}} + E_a^{\text{intr}} \equiv E_b^{\text{th}}, \quad (4.6)$$

не зависит от канала  $a$  и определяет абсолютный порог  $E_b^{\text{th}}$  для канала  $b$ . Ниже этого порога канал  $b$  *закрыт*.

## 4.2. Матрица рассеяния для многоканальных реакций

Теперь мы можем обобщить одноканальное описание на случай многих открытых каналов. Здесь мы также будем пользоваться стационарной формулировкой, оставаясь на энергетической поверхности при фиксированной величине  $E$ .

В канале  $a$  волновая функция системы ( $a + A$ ) может быть представлена как произведение функции  $\psi^a$ , описывающей относительное движение, и внутренней волновой функции  $\Phi^a$  частиц  $a$  и  $A$ :

$$\Psi^a = \psi^a \Phi^a. \quad (4.7)$$

Полная волновая функция реакции содержит все возможные каналы:

$$\Psi = \sum_a \Psi^a. \quad (4.8)$$

В упругом канале  $a \rightarrow a$  волновая функция относительного движения  $\psi^a(\mathbf{r})$  имеет стандартный асимптотический вид

$$\psi^a \approx e^{ik_a z} + f^{aa}(\theta) \frac{e^{ik_a r}}{r}, \quad (4.9)$$

где ось  $z$  взята в направлении падающего пучка,  $f^{aa}(\theta)$  — упругая амплитуда и  $k_a$  — волновой вектор относительного движения в этом канале,  $\varepsilon_a = \hbar^2 k_a^2 / 2\mu_a$ . Волновые функции неупругих каналов  $b \neq a$  не имеют падающей волны. В асимптотической области функция  $\psi^{b \neq a}$  содержит только расходящуюся сферическую волну с неупругой амплитудой  $f^{ba}$ . Удобно нормировать неупругие амплитуды таким образом, чтобы в асимптотике

$$\psi^b \approx f^{ba}(\theta) \sqrt{\frac{\mu_b}{\mu_a}} \frac{e^{ik_b r}}{r}. \quad (4.10)$$

С определением (4.10) радиальный поток, уходящий к детектору площади  $d\mathcal{A} = r^2 d\Omega_b$  в канале  $b$ , равен

$$j_b d\mathcal{A} = \frac{|f^{ba}|^2}{r^2} \frac{\mu_b}{\mu_a} v_b r^2 d\Omega_b. \quad (4.11)$$

Здесь  $v_b = \hbar k_b / \mu_b$  — относительная скорость в канале  $b$ . Разделив на падающий поток, найдём дифференциальное сечение реакции  $a \rightarrow b$ :

$$\frac{d\sigma^{ba}}{d\Omega_b} = |f^{ba}|^2 \frac{\mu_b v_b}{\mu_a v_a} = |f^{ba}|^2 \frac{k_b}{k_a}. \quad (4.12)$$

Отношение волновых векторов связано с доступной плотностью конечных состояний, которая уже появлялась и в борновском приближении.

Матрица рассеяния  $S$  теперь является оператором в пространстве каналов. Обобщая одноканальное выражение, определим матричный элемент этого оператора для перехода  $a \rightarrow b$  как

$$S^{ba} \equiv (1 - iT)^{ba} = \delta^{ba} + 2i\sqrt{k_a k_b} f^{ba}. \quad (4.13)$$

Эти определения матрицы перехода  $T$  и амплитуды  $f$  согласуются с (1.22) и (1.62). Матрицы  $S, T$  и  $f$  всё ещё операторы по дополнительным квантовыми числам состояний канала. Сечение реакции (4.12) теперь может быть переписано как

$$\frac{d\sigma^{ba}}{d\omega_b} = \frac{1}{4k_a^2} |S^{ba} - \delta^{ba}|^2 = \frac{|T^{ba}|^2}{4k_a^2}. \quad (4.14)$$

Если взаимодействие в некотором канале является центрально симметричным, то мы можем использовать для волновой функции в этом канале разложение по парциальным волнам, см. гл. 2. Тогда  $S^{ba}, T^{ba}$  и  $f^{ba}$  диагональны по орбитальному моменту  $\ell$ , так что уравнение (4.13) может быть написано для каждой парциальной волны

$$S_\ell^{ba} = \delta^{ba} - iT_\ell^{ba} = \delta^{ba} + 2i\sqrt{k_a k_b} f_\ell^{ba}. \quad (4.15)$$

Это очевидное обобщение выражения (2.7), полученного для упругого рассеяния.

Предполагая центральную симметрию, мы можем выразить парциальные амплитуды рассеяния через соответствующие элементы матрицы рассеяния

$$f_\ell^{aa} = \frac{S_\ell^{aa} - 1}{2ik_a}, \quad f_\ell^{ba} = \frac{S_\ell^{ba}}{2i\sqrt{k_a k_b}}. \quad (4.16)$$

Используя в (4.12) разложение по парциальным волнам и интегрируя по углам подобно тому, как это было сделано в (2.10), мы получаем

$$\sigma_{\text{el}} \equiv \sigma^{aa} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_\ell (2\ell + 1) |S_\ell^{aa} - 1|^2, \quad (4.17)$$

$$\sigma^{b \neq a} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_\ell (2\ell + 1) |S_\ell^{ba}|^2. \quad (4.18)$$

С другой стороны, полное неупругое сечение было найдено в (2.10) как сечение поглощения. В наших теперешних обозначениях

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(1 - |S_{\ell}^{aa}|^2). \quad (4.19)$$

По определению поглощения

$$\sigma_{\text{inel}} = \sum_{b \neq a} \sigma^{ba} \quad (4.20)$$

и из сравнения (4.18) и (4.19)

$$1 - |S_{\ell}^{aa}|^2 = \sum_{b \neq a} |S_{\ell}^{ba}|^2. \quad (4.21)$$

Это не что иное, как частная форма условия унитарности (1.19), т. е. сохранения вероятностей теперь в пространстве каналов

$$S^{\dagger} S = 1 \quad \rightsquigarrow \quad \sum_b S^{ba*} S^{bc} = \delta^{ac}. \quad (4.22)$$

При  $c = a$  выражения (4.22) и (4.21) совпадают. В терминах матрицы перехода унитарность выражается как

$$T^{\dagger} T - i(T - T^{\dagger}) = 0. \quad (4.23)$$

### 4.3. Детальное равновесие

Важные свойства многоканальной матрицы рассеяния следуют из *инвариантности относительно обращения времени*. В силу этой инвариантности амплитуда  $f^{ba}$  процесса  $a \rightarrow b$  должна быть равна амплитуде  $f^{\tilde{a}\tilde{b}}$   $\mathcal{T}$ -обращённого процесса  $\tilde{b} \rightarrow \tilde{a}$ .

Как мы знаем, обращение времени включает перестановку начального и конечного состояний и обращение (обозначаемое тильдой) всех импульсов и угловых моментов. Таким образом, инвариантность относительно обращения времени даёт связь между амплитудами прямых и обратных реакций

$$f^{ba} = f^{\tilde{a}\tilde{b}}, \quad S^{ba} = S^{\tilde{a}\tilde{b}}, \quad (4.24)$$

для бесспиновых частиц мы бы имели соотношение взаимности  $S^{ba} = S^{ab}$  [8]. Используя уравнение (4.24), получаем для дифференциального сечения (4.12) обратного процесса

$$\frac{d\sigma^{\tilde{a}\tilde{b}}}{do_{\tilde{a}}} = |f^{\tilde{a}\tilde{b}}|^2 \frac{k_{\tilde{a}}}{k_{\tilde{b}}} = |f^{ba}|^2 \frac{k_a}{k_b}, \quad (4.25)$$

поскольку величина импульса не меняется при обращении времени. Уравнения (4.12) и (4.25) позволяют сформулировать принцип *детального равновесия* как соотношение между сечениями прямых и обратных процессов

$$\frac{d\sigma^{\tilde{a}\tilde{b}}}{do_{\tilde{a}}} k_b^2 = \frac{d\sigma^{ba}}{do_b} k_a^2. \quad (4.26)$$

Естественно, поскольку сравнение идёт при той же величине энергии  $E$  в системе центра масс, кинематики для этих двух процессов просто меняются местами.

В *борновском приближении* инвариантность относительно обращения времени ведёт к дополнительным симметриям, как уже обсуждалось в разд. 2.10. В многоканальной задаче это тоже имеет место. Элементы  $S$ -матрицы в борновском приближении пропорциональны соответствующим матричным элементам гамильтониана возмущения (1.38),  $S^{ba} \propto \langle b|H'|a\rangle$ . Поскольку гамильтониан эрмитовский  $|S^{ba}|^2 = |S^{ab}|^2$ , и мы получаем соотношение, подобное (4.26), но для прямой  $a \rightarrow b$  и *обратной*  $b \rightarrow a$  реакций без обращения времени

$$\left(\frac{d\sigma^{ab}}{do_a}\right)_B k_b^2 = \left(\frac{d\sigma^{ba}}{do_b}\right)_B k_a^2. \quad (4.27)$$

Здесь нижний индекс  $B$  обозначает борновское приближение.

Комбинируя инвариантность относительно обращения времени  $a \rightarrow \tilde{b}$ ,  $b \rightarrow \tilde{a}$ , с борновской симметрией  $a \leftrightarrow b$ , мы заключаем, что имеется инвариантность по отношению к простому изменению знаков импульсов и спинов без обращения времени  $a \rightarrow \tilde{a}$ ,  $b \rightarrow \tilde{b}$ . В этом причина, по которой не появляется поляризация при рассеянии неполяризованных частиц в борновском приближении, см. разд. 2.10. Ненулевая поляризация возникает (задача 2.7) для *комплексного* потенциала, который имитирует существование неупругих каналов, но нарушает эрмитовость и инвариантность относительно обращения времени. Если вместо комплексного потенциала мы бы описывали поглощение явно, с помощью неупругих ка-

налов, результат для упругого рассеяния выходил бы за рамки борновского приближения.

Часто *усреднённая* форма принципа детального равновесия (4.26) бывает довольно полезной. Пусть  $J_a$  и  $m_a$  соответственно спин частицы  $a$  (полный внутренний угловой момент) и его проекция. Определим усреднённое сечение  $\overline{\sigma^{ba}}$  путём интегрирования по конечным углам  $do_b$ , суммирования по проекциям спинов  $m_b$  и  $m_B$  конечных частиц, усреднения по проекциям спинов  $m_a$  и  $m_A$  начальных частиц и усреднения по направлениям  $\mathbf{k}_a$  падающей волны:

$$\overline{\sigma^{ba}} = \left( \frac{1}{2J_a + 1} \sum_{m_a} \right) \left( \frac{1}{2J_A + 1} \sum_{m_A} \right) \sum_{m_b} \sum_{m_B} \int \frac{do_a}{4\pi} \int do_b \frac{d\sigma^{ba}}{do_b}. \quad (4.28)$$

Здесь вклады  $a \rightarrow b$  и  $\tilde{a} \rightarrow \tilde{b}$  входят на равных основаниях. Поэтому для усреднённых сечений имеем

$$\overline{\sigma^{ba}} = \overline{\sigma^{\tilde{b}\tilde{a}}}. \quad (4.29)$$

Если мы проведём ту же процедуру усреднения (4.28) для принципа детального равновесия (4.26), мы придём к его усреднённой версии

$$(2J_a + 1)(2J_A + 1)k_a^2 \overline{\sigma^{ba}} = (2J_b + 1)(2J_B + 1)k_b^2 \overline{\sigma^{ab}}. \quad (4.30)$$

Выполнение соотношения (4.30) между сечениями прямых и обратных реакций — это простейшая проверка инвариантности относительно обращения времени.

#### 4.4. Сечения для медленных частиц

Вблизи порога для данного канала возникшие частицы движутся очень медленно. Начальные частицы также могут быть медленными. В этих случаях можно получить общие оценки по аналогии с результатами гл. 2 для низкоэнергетического потенциального рассеяния. Такие универсальные оценки, связанные с малой плотностью состояний в континууме, доступных для медленных частиц, имеют смысл только для плавной зависимости от энергии, что может иметь место для фона под возможными резонансами, которые отвечают относительно долгоживущим квазистационарным состояниям.

Мы начнём с *экзотермической реакции*, где начальная кинетическая энергия мала. Пусть  $R_a$  — радиус сил между частицами во входном канале  $a$ . Волновой вектор  $k_a$  и кинетическую энергию  $\varepsilon_a = \hbar^2 k_a^2 / 2\mu_a$  можно считать малыми, когда, в согласии с критерием (2.58), длина волны относительного движения велика по сравнению с радиусом взаимодействия,  $k_a R_a \ll 1$ . В области взаимодействия  $r < R_a$  парциальные волны с орбитальными моментами  $\ell \neq 0$  подавлены  $\propto (k_a r)^\ell \ll 1$ , см. (II.2.80). Соответствующие амплитуды реакции малы, и мы можем использовать оценку по теории возмущений, предполагая, что амплитуды перехода пропорциональны матричному элементу гамильтониана взаимодействия  $H'_{ba}$ . В пределе малых  $k_a$  оператор  $\hat{H}'$  не зависит от малой входной энергии.

Для *упругого* рассеяния  $a \rightarrow a$  обе, начальная и конечная, волновые функции в этом матричном элементе пропорциональны  $k_a^\ell$ . Поэтому амплитуда перехода  $f_\ell^{aa} \propto k_a^{2\ell}$  и для упругого сечения (4.12) с  $b = a$  мы получаем

$$\sigma_\ell^{aa} \propto k_a^{4\ell} \propto \varepsilon_a^{2\ell}. \quad (4.31)$$

Это та же оценка, которая была выведена для потенциального рассеяния через фазовые сдвиги, см. (4.14) и (4.57).

Для *неупругого экзотермического* процесса  $a \rightarrow b$  конечный волновой вектор  $k_b$  имеет ненулевую величину  $(2m_b Q_{ba})^{1/2} / \hbar$ , которая не зависит от начального волнового вектора  $k_a$ , когда  $k_a \rightarrow 0$ . Потому в матричном элементе  $H'_{ba}$  только начальная функция чувствительна к  $k_a$ , так что  $f_\ell^{ba} \propto k_a^\ell$  и, согласно (4.12),

$$\sigma_\ell^{ba} \propto \frac{k_a^{2\ell}}{k_a} \propto k_a^{2\ell-1} \propto \varepsilon_a^{\ell-1/2}. \quad (4.32)$$

При низких энергиях только  $s$ -волна взаимодействует эффективно. Для  $s$ -волнового поглощения мы получаем возрастание сечения в согласии с законом  $1/v$

$$\sigma_0^{ba} \propto \varepsilon_a^{-1/2} \propto \frac{1}{v_a}. \quad (4.33)$$

Закон  $1/v$  справедлив для нейтральной частицы  $a$ , например для захвата медленного нейтрона ядром, который сопровождается излучением другой частицы (протона или альфа) или гамма-кванта. Если начальная частица  $a$  имеет положительный заряд, то центробежный барьер, порождающий  $\ell$ -зависимость в выражениях (4.31) и (4.32), дополняется кулоновским барьером. Вероятность поглощения тогда включает дополнительно пропускательность кулоновского барьера (*фактор Гамова*), см. (I.2.66), который

зависит от произведения  $Z_a Z_A$  зарядов частиц  $a$  и  $A$ ,

$$P_a = e^{-2\pi Z_a Z_A e^2 / \hbar v_a}. \quad (4.34)$$

В результате сечение поглощения для медленных частиц становится очень малым.

Для *эндотермической* реакции  $a \rightarrow b$ , например рассеяния нейтрона с возбуждением ядра мишени, мы можем сделать общее заключение о сечениях вблизи порога, когда рассеянный нейтрон (частица  $b$ ) имеет очень малую энергию  $\varepsilon_b = \varepsilon_a + Q_{ba} = \varepsilon_a - \varepsilon_a^{\text{th}}$  и конечный волновой вектор равен

$$k_b = \sqrt{\frac{2m_b}{\hbar^2}(\varepsilon_a - \varepsilon_a^{\text{th}})}. \quad (4.35)$$

В этом случае *конечное* относительное движение медленно и его волновая функция чувствительна к малому избытку энергии над порогом, будучи пропорциональной  $k_b^\ell$ , если конечное состояние имеет относительный орбитальный момент  $\ell$ . Такое же выражение (4.12) определяет сечение вблизи порога для испускания частицы в  $\ell$ -той парциальной волне:

$$\sigma_\ell^{ba} \propto k_b^{2\ell} k_b \propto k_b^{2\ell+1} \propto (\varepsilon_a - \varepsilon_a^{\text{th}})^{\ell+1/2}. \quad (4.36)$$

Опять сечение заметно только в  $s$ -волне, где оно растёт как корень квадратный из избытка энергии над порогом. Для вылета положительно заряженной частицы сечение, как и раньше, подавлено проникаемостью  $P_b$  (4.34).

## 4.5. Пороги и унитарность

Требование унитарности является мощным инструментом, который диктует многие черты сечений. С увеличением энергии открываются новые каналы реакции. Каждый новый порог есть особая точка в матрице рассеяния как функции энергии: в связи с появлением нового канала, который имеет очень малое сечение около порога, сечения в ранее открытых каналах следует изменить для выполнения условия унитарности (4.22), что накладывает ограничение на все открытые каналы через сохранение вероятности. Не входя в детали аналитических свойств  $S$ -матрицы, мы проиллюстрируем возможное поведение на простом примере [19].

Упругий канал  $a$  открыт при любой положительной кинетической энергии  $\varepsilon_a$ . Рассмотрим упругое сечение вблизи порога для неупругой реакции  $a \rightarrow b$ .

Общий асимптотический вид многоканальной волновой функции (4.8) в реакции, инициируемой во входном канале  $a$ , есть, согласно (4.10) и (4.16),

$$\Psi \approx e^{i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a)} \Phi^a + \sum_b \frac{e^{ik_b r_b}}{r_b} \sqrt{\frac{\mu_a}{\mu_b}} \frac{1}{2i\sqrt{k_a k_b}} \sum_\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta_b) (S_\ell^{ba} - \delta^{ba}) \Phi^b. \quad (4.37)$$

Ниже порога реакции  $a \rightarrow b$ , волновой вектор  $k_b$  в закрытом канале  $b$  чисто мнимый, см. (4.35),  $k_b = i\kappa_b$  с вещественной величиной  $\kappa_b > 0$ , где знак определяется правильным поведением волновой функции на больших расстояниях  $r_b$  в канале  $b$ : соответствующая часть волновой функции (4.37) убывает экспоненциально,  $\propto \exp(-\kappa_b r_b)$ . Это значит, что вероятность найти частицы  $b$  и  $B$  в асимптотике  $r_b \rightarrow \infty$  равна нулю ниже порога, хотя эти частицы виртуально появляются на малых расстояниях  $r_b < \kappa_b^{-1}$ . Размер локализации возрастает с уменьшением энергии связи  $\hbar^2 \kappa^2 / 2\mu_b$ . Канал  $b$  открывается (частицы  $b$  и  $B$  не связаны) при  $k_b = \kappa_b = 0$ , или  $\kappa_b^{-1} \rightarrow \infty$ , когда асимптотическая форма (4.37) превращается в реальную уходящую волну, соответствующую этому каналу, и частица  $b$  может достичь удалённого детектора.

Рассмотрим  $s$ -волну, когда условие унитарности (4.21) для двух открытых каналов  $a$  и  $b$  даёт

$$|S_0^{aa}|^2 = 1 - |S_0^{ba}|^2. \quad (4.38)$$

Сразу выше порога реакции  $a \rightarrow b$  правая часть уравнения (4.38) линейна по  $k_b$ , как мы видели в (4.36),

$$|S_0^{ba}|^2 = \rho k_b, \quad (4.39)$$

где  $\rho$  — действительная положительная константа. Тогда

$$|S_0^{aa}|^2 = 1 - \rho k_b. \quad (4.40)$$

Следовательно, упругий элемент  $S$ -матрицы имеет с точностью до членов, квадратичных по  $k_b$ , вид, справедливый выше порога,

$$S_0^{aa} = M(k_b) \left( 1 - \frac{\rho}{2} k_b \right), \quad (4.41)$$

где  $M(k_b)$  — неизвестная фаза,

$$|M(k_b^2)|^2 = 1 \quad \rightsquigarrow \quad M(k_b) = e^{i\varphi(k_b)} \quad (4.42)$$

с действительной фазой  $\varphi(k_b)$ . В пороговой области (малые  $k_b > 0$ ) мы можем разложить эту функцию в ряд Тэйлора с действительными коэффициентами  $\varphi_n$ ,

$$\varphi(k_b) \approx \varphi_0 + \varphi_1 k_b + \frac{1}{2} \varphi_2 k_b^2 + \dots \quad (4.43)$$

Ниже порога канал  $a \rightarrow b$  закрыт и

$$|S_0^{aa}|^2 = 1. \quad (4.44)$$

Здесь  $S$ -матрица полностью определена фазами рассеяния. Точно на пороге

$$S_0^{aa}(k_b = 0) = e^{2i\delta_0}, \quad (4.45)$$

где фаза рассеяния  $\delta_0$  взята при пороговой энергии. Из (4.41-4.45) мы видим, что

$$\varphi_0 = 2\delta_0. \quad (4.46)$$

Теперь мы предположим, что возможно аналитически продолжить упругую часть  $S$ -матрицы (4.41) в подпороговую область, где это выражение приобретает вид

$$S_0^{aa} = M(i\kappa_b) \left(1 - i\frac{\rho}{2} \kappa_b\right). \quad (4.47)$$

Это выражение должно быть совместимо с условием унитарности (4.44) ниже порога, которое даёт

$$1 = |S_0^{aa}|^2 = |M(i\kappa_b)|^2 \left(1 - i\frac{\rho}{2} \kappa_b\right) \left(1 + i\frac{\rho}{2} \kappa_b\right) \approx |M(i\kappa_b)|^2, \quad (4.48)$$

если мы пренебрежём членами более высокого порядка, чем первая степень  $k_b$ . Таким образом, уравнение (4.42) удовлетворено по обе стороны порога, и в обеих областях фаза  $\varphi(k_b)$  должна быть действительной. С другой стороны, ниже порога мы имеем вместо (4.43)

$$\varphi \approx 2\delta_0 + i\varphi_1 \kappa_b - \frac{1}{2} \varphi_2 \kappa_b^2 + \dots, \quad (4.49)$$

и функция  $\varphi$  действительна, только если это чётная функция волнового вектора, а все нечётные коэффициенты ряда Тэйлора исчезают. Поэтому  $\varphi_1 = 0$ . Окончательно, с точностью до членов порядка  $k_b^2$ , упругая часть  $S$ -матрицы может быть записана и выше и ниже порога как

$$S_0^{aa} = e^{2i\delta_0} \left(1 - \frac{\rho}{2} k_b\right) + O(k_b^2); \quad (4.50)$$

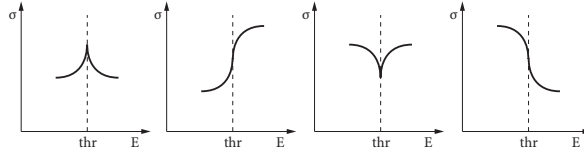


Рис. 4.1. Пороговые аномалии

ниже порога нужно просто заменить  $k_b$  на  $i\kappa_b$ .

Упругое сечение (4.17) вблизи порога (с обеих сторон!) может быть записано теперь с помощью (4.50) как

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k_a^2} |1 - S_0^{aa}|^2 = \frac{\pi}{k_a^2} \left\{ 4 \sin^2 \delta_0 - \rho \operatorname{Re} \left[ k_b \left( 1 - e^{2i\delta_0} \right) \right] \right\} + O(k_b^2). \quad (4.51)$$

Выше порога реакции  $a \rightarrow b$

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k_a^2} \left[ 4 \sin^2 \delta_0 - \rho k_b (1 - \cos 2\delta_0) \right] \quad (4.52)$$

или, введя упругое сечение точно на пороге,

$$\sigma_{\text{el}}^{\text{th}} = \frac{4\pi}{k_a^2} \sin^2 \delta_0, \quad (4.53)$$

и выражение (4.35) для волнового вектора  $k_b$  выше порога, мы получаем

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{el}}^{\text{th}} \left[ 1 - \frac{\rho}{2} \sqrt{\frac{2\mu_b}{\hbar^2} (\varepsilon_a - \varepsilon_a^{\text{th}})} \right]. \quad (4.54)$$

Между тем, ниже порога, с мнимым  $k_b = i\kappa_b$ , мы имеем из (4.51)

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k_a^2} (4 \sin^2 \delta_0 - \rho \kappa_b \sin 2\delta_0) = \sigma_{\text{el}}^{\text{th}} \left[ 1 - \frac{\rho}{2} \cot \delta_0 \sqrt{\frac{2\mu_b}{\hbar^2} (\varepsilon_a^{\text{th}} - \varepsilon_a)} \right]. \quad (4.55)$$

Сравнивая выражения (4.54) и (4.55), мы видим разрыв производной упругого сечения как функции энергии в упругом канале  $a$  на пороге неупругой реакции  $a \rightarrow b$ . Этот «острый выступ» определяется величиной и знаком  $\cot \delta_0$  на пороге. Рис. 4.1 [19] демонстрирует возможные типы порогового поведения упругого сечения.

Аномалия не появляется, если частицы  $b$  и  $B$  испытывают взаимное кулоновское *отталкивание*. В этом случае проникаемость кулоновского

барьера (фактор Гамова (4.34)) в канале  $b$  стремится к нулю на пороге, когда  $v_b \rightarrow 0$ . Для кулоновского притяжения в канале  $b$  ситуация более сложная из-за резонансов, связанных с дискретными кулоновскими состояниями.

#### 4.6. Изолированный резонанс; экспоненциальный и неэкспоненциальный распад

Типичную резонансную реакцию можно представлять как процесс, идущий через захват частицы  $a$  мишенью  $A$  с образованием промежуточного состояния  $r$ . Через некоторое время нестабильное состояние  $r$  распадается на конечные продукты  $b$  и  $B$ , которые могут быть, в частности, теми же, что и во входном канале  $a$ . Чтобы избежать более сложных вопросов интерференции между различными резонансами, мы будем сначала предполагать, что ширина  $\Gamma$  резонанса  $r$  мала по сравнению с расстоянием до других резонансов — резонансы *не перекрываются*.

Напомним наше первоначальное обсуждение нестабильных состояний, разд. I.5.8. Перекрытие вектора состояния  $|\Psi(t)\rangle$  с начальным состоянием  $|\Psi_0\rangle$  убывает со временем предположительно экспоненциально

$$P(t) = |\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle|^2 \approx e^{-\Gamma t/\hbar}. \quad (4.56)$$

Перекрытие (4.56) есть *вероятность выживания*, см. разд. I.7.8. Ширина  $\Gamma$  определяет среднее время жизни состояния  $|\Psi_0\rangle$ ,  $\tau = \hbar/\Gamma$ , и неопределённость его энергии  $\Delta E \sim \hbar/\tau \sim \Gamma$ . Зависимость от времени (4.56) имеет место, если волновой функции изменяется согласно

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)\mathcal{E}t} |\Psi_0\rangle, \quad (4.57)$$

где мы ввели *комплексную энергию*  $\mathcal{E} = E_0 - \frac{i}{2}\Gamma$ ; её действительная часть  $E_0$  характеризует собственно энергию, а мнимая часть даёт ширину — обратное время жизни. Все резонансные точки  $\mathcal{E}$  расположены в нижней части комплексной плоскости энергии  $\Gamma > 0$ . Нормированное распределение вероятности действительной части энергии даётся распределением Лоренца (I.5.79), которое в теории реакций носит название формулы *Брейта—Вигнера* (1936), см. рис. I.5.10,

$$w(E) = \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dE w(E) = 1. \quad (4.58)$$

Важной особенностью распределения Брейта—Вигнера является *бесконечность её второго момента*: интеграл  $\int dE(E - E_0)^2 f(E)$  расходится из-за слишком медленного убывания далёких крыльев распределения Брейта—Вигнера. Но мы знаем (см. разд. I.5.8), что распределение Брейта—Вигнера не является полностью реалистичным для всех энергий. Присутствие бесконечно низких энергий в (4.58) нефизично, потому что нет состояний в гильбертовом пространстве системы с энергиями ниже, чем энергия основного состояния. Поэтому нельзя утверждать, что экспоненциальное убывание (4.56) справедливо в течение всего процесса распада.

Реальное временное поведение распадающегося состояния заведомо должно отличаться от (4.56), по крайней мере на начальной стадии, как мы видели в разд. I.7.8. На ранней стадии эволюции скорость распада определяется неопределённостью (флуктуацией) энергии  $\langle(\Delta E)^2\rangle$  в начальном нестационарном волновом пакете. Согласно уравнению (I.7.119), *вероятность* распада  $1 - P(t)$  растёт *квадратично* со временем (*скорость* распада  $-\dot{P}$  возрастает линейно), в то время как для экспоненциального распада вероятность распада линейна, а скорость распада постоянна. Здесь уместно вспомнить вывод в разд. II.11.1 золотого правила, которое предсказывает постоянную скорость перехода (II.11.6). Это имеет место только при достаточно большой длительности процесса, больше, чем время действия возмущения. На очень коротких временах при замене синуса на его аргумент в уравнении (II.11.8) мы получаем результат, аналогичный (I.7.119),

$$|a_f(t)|^2 = |H'_{fi}|^2 \frac{t^2}{\hbar^2}. \quad (4.59)$$

Такое же поведение, типичное для малого времени действия возмущения  $\Omega t \ll 1$ , можно увидеть в двухуровневой задаче, см. (II.5.56). В идеализированном случае Брейта—Вигнера неопределённость энергии  $\langle(\Delta E)^2\rangle$  бесконечна и разложения, используемые в (I.7.117) и (I.7.118), неверны.

#### Задача 4.1

Доказать неравенство (I.7.127) для вероятности выживания при  $t < \pi\hbar/2(\Delta E)$ , где  $\Delta E$  — неопределённость энергии начального состояния,

$$P(t) \geq \cos^2 \left( (\Delta E) \frac{t}{\hbar} \right), \quad (4.60)$$

используя альтернативное представление вероятности выживания в терминах спектра  $E_n$  стационарных состояний  $|n\rangle$

$$P(t) = \sum_{nm} |c_n|^2 |c_m|^2 \cos\left(\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}\right), \quad (4.61)$$

где  $|\Psi_0\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ .

## 4.7. Квантовый эффект Зенона

Проблема экспоненциального или неэкспоненциального распада близко связана с возобновлением дискуссии по так называемым *парадоксам Зенона*. Оригиналы парадоксов, приписываемых древнему философу Зенону из Илеи (*Зенон Илейский*), обсуждались в «*Физике*» *Аристотеля*.

Древние парадоксы имеют отношение к природе пространства и времени. Ахиллес никогда не догонит черепаху, потому что за любое конечное время его движения черепаха продвинется чуть дальше; нельзя начать движение, потому что прежде чем пройти всю дистанцию, нужно пройти половину её и т. д.; движение невозможно вообще, потому что в любой момент времени летящая стрела занимает определённое положение в пространстве и кажется неподвижной — ваше наблюдение "замораживает" движение. Аналогию с парадоксом стрелы можно найти [20] в мысленном эксперименте с распадающейся квантовой системой.

Грубо парадокс можно описать следующим образом. Если начальное состояние  $|\Psi_0\rangle$  системы, приготовленное при  $t = 0$ , нестационарно, то при  $t > 0$  оно эволюционирует как суперпозиция  $|\Psi_0\rangle$  стационарных и ортогональных состояний (продуктов распада). Однако если измерение обнаружит систему всё ещё в первоначальном состоянии, то это можно рассматривать как новое приготовление системы, и начать отсчёт времени сначала. Производя измерения через очень короткие промежутки времени, представляется возможным полностью затормозить распад. Можно даже думать, что *отрицательный результат*, ненаблюдение распада, должен уже сделать распад невозможным. Действительно, если наш детектор не регистрирует никаких продуктов распада, то это эквивалентно измерению отсутствия распада и, следовательно, утверждению, что система находится в начальном состоянии  $|\Psi_0\rangle$ ; тогда можно снова начать отсчёт времени с нуля.

Вернёмся к вероятности выживания (4.56) и предположим, что за короткий интервал времени  $\delta t$  эта вероятность убывает на

$$P(\delta t) = 1 - x(\delta t)^\alpha, \quad (4.62)$$

где  $x > 0$  зависит от свойств начального состояния, а  $\alpha > 0$  — некоторая степень, равная 1 для чисто экспоненциального распада. Повторим измерения начального состояния  $N$  раз за конечный интервал времени  $t = N \cdot \delta t$ . Тогда полная вероятность выживания даётся

$$P_N(t) = \left[ 1 - x \left( \frac{t}{N} \right)^\alpha \right]^N. \quad (4.63)$$

В пределе непрерывных измерений  $\delta t \rightarrow 0$ ,  $N \rightarrow \infty$  при фиксированной конечной величине  $t$

$$P(t) \rightarrow \exp \left[ -xt(\delta t)^{\alpha-1} \right]. \quad (4.64)$$

Здесь видно различие между экспоненциальным  $\alpha = 1$  и неэкспоненциальным распадом. При  $\alpha = 1$  распад продолжается экспоненциально независимо от стратегии измерений. В противоположность этому при  $\alpha > 1$ , как это имеет место в стандартной ситуации с  $\alpha = 2$ , вероятность распада подавлена. При  $\delta t \rightarrow 0$  вероятность выживания стремится к 1.

На самом деле нельзя делать непрерывные измерения. Любые такие попытки в соответствии с соотношением неопределённости энергия-время будут сильно искажать исследуемую систему. Тем не менее, наличие эффекта Зенона за конечные, но короткие интервалы между измерениями было подтверждено экспериментами с атомами в ловушке под влиянием периодических лазерных импульсов [21]. Поскольку неэкспоненциальный этап охватывает лишь небольшую часть начальной истории распада, существует характерное время (иногда называется *временем Зенона*  $t_Z$ , оно обычно того же порядка, что и типичные периоды невозмущённого движения в квазистационарной системе), когда имеет место переход к нормальному экспоненциальному поведению. Здесь измерения могут действовать в противоположном направлении, *ускоряя* процессы распада. Этот *антиэффект Зенона* также был найден экспериментально [22]. Ситуацию может также осложнить вмешательство *волны отдачи*, идущей назад от измерительной аппаратуры с примесями невозмущённых состояний, отличных от имеющих в начальном состоянии. Эти помехи могут вносить колебания во временном развитии вероятности выживания.

Все эти нетривиальные эффекты появляются только вследствие физического взаимодействия устройства детектирования и распадающейся или колеблющейся системы. Для того чтобы разрушить суперпозицию состояний, соответствующую начавшемуся распаду, и вернуть систему в исходное состояние, гамильтониан  $\hat{H}_d$  взаимодействия с детектором *не должен коммутировать* с внутренним гамильтонианом  $\hat{H}'$ , ответственным за распад. (Мы еще вернемся к проблеме измерений в конце курса.) Если пассивный детектор просто ждёт прихода продуктов распада, но не взаимодействует непосредственно с системой, то он не может влиять на скорость распада — его гамильтониан коммутирует с  $\hat{H}'$ . Поэтому эксперимент с «отсутствием результата» не производит никакого действия на систему, и такой парадокс Зенона исключён [23].

Нужно отметить, что неэкспоненциальный ход процесса распада имеет место и в самой поздней стадии, которая трудна для измерения из-за очень небольшого количества оставшегося материала. В некоторых ядерных процессах экспоненциальное развитие прослеживалось в течение 40-50 времён полураспада. Механизм отклонения от экспоненциального распада при  $t \gg \tau$  можно понять на простой модели [24].

### Задача 4.2

Найти поведение в пределе больших времен вероятности выживания в потенциале рис. 4.2 с непроницаемой стенкой при  $x = -a$  и отталкивающим барьером  $g\delta(x)$  при  $x = 0$ , если вначале частица была приготовлена в стационарном состоянии ящика  $-a \leq x \leq 0$ .

### Решение.

Начальная волновая функция даётся как

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad -a \leq x \leq 0, \quad (4.65)$$

и  $\Psi_0 = 0$  вне ящика. Развитие во времени определяется стационарными состояниями  $\psi_k(x)$  фактического потенциала. Они нумеруются волновым вектором  $k$  задачи рассеяния с энергией  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Условие регулярности при  $x = -a$  даёт

$$\psi_k(x) = \begin{cases} A(k) \sin[k(x+a)], & -a \leq x \leq 0, \\ B(k)e^{ikx} + B'(k)e^{-ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (4.66)$$

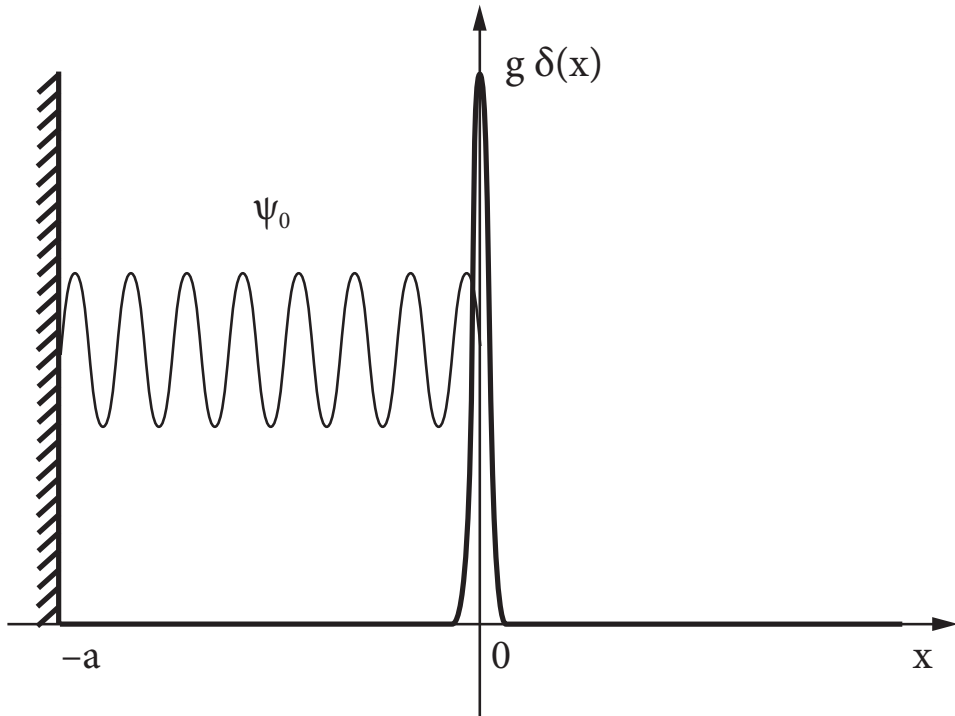


Рис. 4.2. Потенциал и начальная волновая функция для задачи 4.2

Стандартные условия сшивки для потенциала, содержащего дельта-функцию, (задача I.9.11) дают

$$\frac{B}{A} = F(k), \quad \frac{B'}{A} = F^*(k), \quad (4.67)$$

где

$$F(k) = \frac{1}{2} \left[ \left( 1 - i \frac{V}{ka} \right) \sin(ka) - i \cos(ka) \right], \quad V = \frac{2mag}{\hbar^2}. \quad (4.68)$$

Поэтому внешняя часть волновой функции (4.66) может быть записана как

$$\psi_k(x \geq 0) = A(k) \left\{ \sin[k(x+a)] + \frac{V}{ka} \sin(ka) \sin(kx) \right\}. \quad (4.69)$$

Начальная функция есть суперпозиция стационарных состояний,

$$\Psi_0(x) = \int_0^\infty dk C(k)\psi_k(x), \quad (4.70)$$

и решение задачи о зависимости от времени даётся выражением

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dk C(k)\psi_k(x)e^{-i\hbar k^2 t/2m}. \quad (4.71)$$

Для нахождения коэффициентов  $C(k)$  воспользуемся ортогональностью набора функций  $\psi_k(x)$ . Их удобно нормировать как

$$\int_{-a}^\infty dx \psi_{k'}(x)\psi_k(x) = \delta(k - k'). \quad (4.72)$$

С этой нормировкой

$$C(k) = \int_{-a}^\infty dx \Psi_0(x)\psi_k(x) \quad (4.73)$$

или, используя явный вид  $\psi_k(x)$ ,

$$C(k) = A(k) \frac{n\pi\sqrt{a/2}}{(ka)^2 - (n\pi)^2} \sin(ka), \quad (4.74)$$

с полюсами, соответствующими энергиям состояний, которые были бы связанными в ящике (резонансы). Вычисляя амплитуды  $A(k)$ , соответствующие нормировке (4.72) функций (4.69), мы сталкиваемся в области  $x > 0$  со следующими двумя сингулярными интегралами:

$$\int_0^\infty dx \sin(k'x) \sin(kx) = \frac{\pi}{2} [\delta(k' - k) - \delta(k' + k)] \quad (4.75)$$

(здесь достаточно выразить подынтегральное выражение через экспоненты) и

$$\frac{1}{k'} \int_0^\infty dx \cos(kx) \sin(k'x) + \frac{1}{k} \int_0^\infty dx \cos(k'x) \sin(kx) = \pi^2 \delta(k)\delta(k'), \quad (4.76)$$

где правая часть, очевидно, должна иметь вид  $Z(k)\delta(k - k')$ . Интегрируя обе части по  $k'$  и пользуясь интегралом Френеля, находим  $Z(k) = \pi^2 \delta(k)$ .

Из этой алгебры

$$A(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k}{[(ka)^2 + kaV \sin(2ka) + V^2 \sin^2(ka)]^{1/2}}. \quad (4.77)$$

Перекрытие начального состояния с состоянием в момент времени  $t$  выражается интегралом

$$\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle = \int_0^\infty dk C^2(k) e^{-i\hbar k^2 t / 2m}. \quad (4.78)$$

Функция  $A^2(k)$  имеет бесконечное число полюсов в комплексной плоскости  $k$ ; они дают экспоненциально убывающие члены в функции перекрытия (4.78). После обсуждавшейся ранее начальной стадии полюс, ближайший к действительной оси, будет определять «нормальный» экспоненциальный распад. Однако в пределе  $t \rightarrow \infty$  экспонента в (4.78) быстро осциллирует, и основной вклад будет давать область *малых волновых векторов*  $ka \ll 1$ . Поскольку тогда  $C^2(k) \propto (ka)^2$ , этот предел определяется интегралом

$$\int_0^\infty dk e^{-i\hbar k^2 t / 2m} (ka)^2 \propto t^{-3/2}, \quad (4.79)$$

который получается при введении новой переменной  $q = k\sqrt{\hbar t / 2m}$ . Тогда *вероятность выживания* ведёт себя степенным образом:

$$P(t) \propto \frac{\text{const}}{t^3}. \quad (4.80)$$

Как видно из решения, неэкспоненциальный распад в пределе больших времён есть следствие существования нижней границы энергетического спектра,  $E = 0$  в этой модели. Рис. 4.3 показывает полную временную зависимость распада;  $\Gamma = \hbar^2 t / 2ma^2$ . Сплошная линия обозначает вероятность выживания, а пунктирная линия обозначает связанную с ней вероятность нахождения частицы внутри ящика  $\int_{-a}^0 dx |\Psi(x, t)|^2$ , которая ведёт себя почти так же, но слегка превышает  $P(t)$ , поскольку она включает вероятность возвращения в ящик, но в состояния, отличные от первоначального.

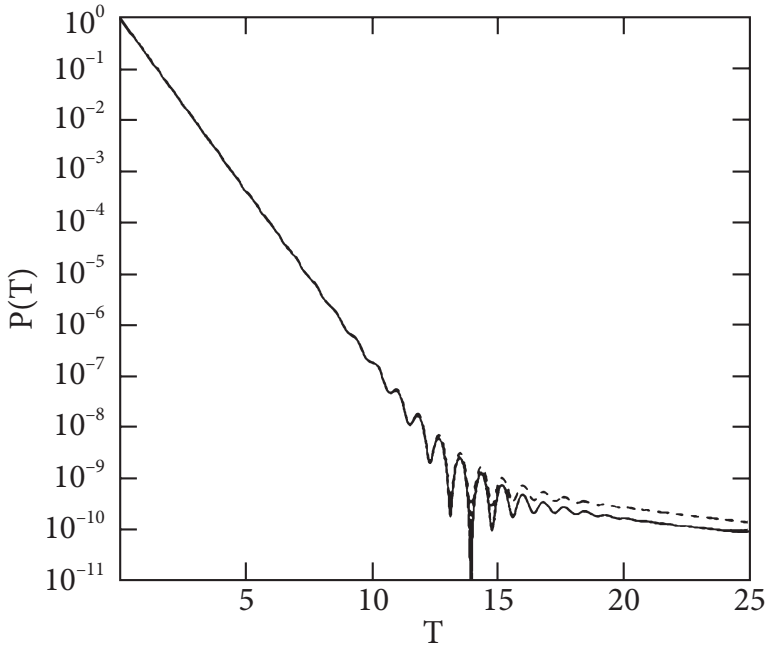


Рис. 4.3. Зависимость от времени распада в модели задачи 4.2 [24]

#### 4.8. Резонансное сечение

Нестабильное состояние может приближённо рассматриваться как принадлежащее дискретному спектру, если его время жизни достаточно велико или соответствующая ширина очень узкая. Дискретный спектр может быть практически выделен, если неопределённость энергии состояний меньше, чем среднее расстояние между уровнями  $D$ ,  $\Delta E \sim \hbar/\tau < D$ ; это значит, что уровни не перекрываются:

$$\kappa \equiv \frac{\Gamma}{D} < 1. \quad (4.81)$$

Волновой пакет, временно захваченный в дискретный спектр с расстоянием между уровнями  $\sim D$ , может быть приближённо представлен как  $\sum_n \exp[(-2\pi i/\hbar)nDt]\psi_n$ . Он (также приближённо) воспроизводит себя с периодом *возврата*, или *временем Вайскопфа*  $\hbar/D$ . Условие (4.81) означает,

что время жизни внутри системы превышает время возврата

$$\tau \sim \frac{\hbar}{\Gamma} > t_r \sim \frac{\hbar}{D}. \quad (4.82)$$

Значение  $\kappa \approx 1$  является границей между двумя физически различными динамическими режимами: слабая связь с континуумом, когда  $\kappa \ll 1$  и спектр состоит из изолированных квазидискретных уровней, и сильная связь, когда  $\kappa \gg 1$  и состояния перекрываются. Долгоживущие состояния во многих отношениях близки к истинно стационарным, и поэтому их часто называют *квазистационарными*.

Нестабильные состояния рождаются в различных реакциях и через некоторое время распадаются обратно в континуум. Они изучаются в процессах возбуждения и снятия возбуждения. В экспериментах по рассеянию долгоживущие состояния видны как узкие резонансы в сечении, измеренном как функция энергии. В режиме без перекрытия параметризация Брейта—Вигнера (4.58) может быть достаточно хорошим приближением. Однако такое феноменологическое описание обычно не входит в детали внутренней структуры резонансных состояний.

Рассмотрим область энергий, где в сечении доминируют изолированные резонансы с *комплексной энергией*  $\mathcal{E} = E_r - (i/2)\Gamma_r$ . Будем строить амплитуду  $T^{ba}$  для процесса  $a \rightarrow b$ , идущего через изолированный резонанс  $r$ , по аналогии с теорией возмущений. Здесь нам нужны процессы как минимум второго порядка,  $a \rightarrow r \rightarrow b$ . Описание такого двухступенчатого процесса должно включать входную амплитуду  $\langle r|A|a \rangle$ , выходную амплитуду  $\langle b|A|r \rangle$ , которые пропорциональны соответствующим матричным элементам полного гамильтониана между состояниями канала и промежуточными состояниями (точное соответствие зависит от нормировки волновых функций в континууме), и энергетический знаменатель, разность между начальной энергией  $E_a$  в канале  $a$  (4.2) и энергией промежуточного состояния. В противоположность нормальной теории возмущений в дискретном спектре промежуточная энергия должна быть заменена комплексной энергией, потому что состояние нестабильно и не имеет определённой действительной энергии. Введём для краткости обозначение для амплитуды перехода  $A_r^b \equiv \langle b|A|r \rangle$ . Тогда амплитуда реакции при энергии  $E = E_a$  принимает брейт—вигнеровский вид

$$T^{ba}(E) = A_r^b \frac{1}{E - E_r + (i/2)\Gamma_r} A_r^{a*}. \quad (4.83)$$

С общим размерным фактором, как в (4.17-4.19), мы получаем эффективное сечение, пропорциональное квадрату модуля амплитуды (4.83):

$$\sigma^{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \left| \frac{A_r^b A_r^{a*}}{E_a - E_r + (i/2)\Gamma_r} \right|^2. \quad (4.84)$$

При такой нормировке амплитуды  $A_r^a$  имеют размерность корня квадратного из энергии. В общем случае они зависят от энергии реакции,  $E = E_a$ , через волновые функции в континууме; они должны исчезать на соответствующих порогах. Однако для узких резонансов и далеко от порогов соответствующих каналов явная зависимость от энергии в энергетическом знаменателе является наиболее значимой, потому что амплитуды и кинематические факторы (функции от  $k_a$  и  $k_b$ ) почти постоянны внутри энергетических интервалов, меньших, чем расстояние между резонансами или от резонанса до порога.

Мы построили формулу Брейта—Вигнера «руками». Главная её особенность — это резонансное поведение, как в (4.58) вокруг энергии  $E_r$ . Энергетическая ширина наблюдаемого сечения  $\Gamma_r$  прямо связана с временем жизни промежуточного состояния. Отметим, что резонансное усиление наблюдается при реальной энергии реакции, в то время как полюс амплитуды расположен в комплексной плоскости. Чем меньше ширина, тем ближе резонансный полюс к действительной оси, тем выше максимум сечения  $\propto \Gamma_r^{-2}$  в точке резонанса  $E = E_r$ . Резонанс виден в любом канале  $b$ , связанном с долгоживущим промежуточным состоянием  $r$  ненулевой амплитудой  $A_r^b$ .

## 4.9. Унитарность и сверхизлучение

Резонансное поведение в нашем феноменологическом подходе определялось положением полюса  $\mathcal{E}_r$  в нижней части комплексной плоскости энергии и набором амплитуд  $A_r^a$  для всех открытых каналов  $a$ , связанных с резонансным внутренним состоянием. Однако эти параметры не могут принимать произвольных значений. Как мы видели в пороговой области, требование унитарности налагает ограничения на элементы матрицы рассеяния.

Проверим, выполняется ли это требование для используемой параметризации, которую можно представить как

$$T^{ba} = A_r^b \mathcal{G} A_r^{a*}, \quad (4.85)$$

где *пропагатор* при данной действительной энергии  $E$

$$\mathcal{G}(E) = \frac{1}{E - \mathcal{E}_r} = \frac{1}{E - E_r + (i/2)\Gamma_r} \quad (4.86)$$

удовлетворяет очевидному тождеству

$$\text{Im } \mathcal{G} \equiv \frac{1}{2i}(\mathcal{G} - \mathcal{G}^*) = -\frac{\Gamma_r}{2} \mathcal{G}^* \mathcal{G}. \quad (4.87)$$

Перемножая матрицы  $T$  и  $T^\dagger$  и учитывая (4.87), мы видим, что условие унитарности (4.23) требует

$$\sum_c |A_r^c|^2 = \Gamma_r. \quad (4.88)$$

Ширина  $\Gamma_r$ , будучи обратно пропорциональна времени жизни резонанса, даёт полную скорость перехода из резонанса  $r$  во все разрешённые каналы распада. Поэтому величины  $A_r^c$  должны интерпретироваться как *парциальные ширины* резонанса  $r$  по отношению к данной моде распада (канал  $c$ ):

$$\Gamma_r^c = |A_r^c|^2, \quad \Gamma_r = \sum_c \Gamma_r^c. \quad (4.89)$$

Если частица  $b$  может быть испущена с оставлением ядра остатка  $B$  в различных конечных состояниях  $B_i$ , то каждому такому состоянию формально соответствует конкретный канал  $b_i \equiv (b + B_i)$ . Тогда мы можем найти полную *ширину испускания* для частицы  $b$  как сумму по всем возможным состояниям ядра остатка

$$\Gamma_r(b) = \sum_{b_i} \Gamma_r^{b+B_i}. \quad (4.90)$$

С возрастанием энергии выше порога ширины нестабильных состояний растут вместе с доступным фазовым объёмом в континууме. Соотношение (4.81) перестаёт выполняться, и резонансы начинают *перекрываться*. В этом режиме появляются новые явления: статистические (*Эриксоновские*) флуктуации сечений из-за хаотических фаз интерферирующих резонансов и аналог оптического *сверхизлучения*, разд. II.11.9. Со связью квазистационарных состояний и континуума, выражаемой амплитудами  $A_r^c$ , эти состояния приобретают новый динамический механизм, аналогичный взаимодействию через *яркое состояние*, см. разд. I.10.7 и I.10.8. Это взаимодей-

ствие между состояниями  $k$  и  $l$  может быть описано неэрмитовой добавкой к внутреннему гамильтониану

$$\tilde{H}_{kl} = -\frac{i}{2} \sum_c (\text{open}) A_k^{c*} A_l^c. \quad (4.91)$$

Грубо говоря, система может виртуально распасться из состояния  $l$  в канал  $c$  и затем вернуться обратно в другое состояние  $k$ , потому что они перекрываются и их энергии не определены внутри ширин. Для изолированных резонансов важен только диагональный член  $k = l$ , и эффективный гамильтониан (4.91) ведёт к комплексной энергии в знаменателе (4.86) с полной шириной одного резонанса (4.88). Формальный вывод эффективного гамильтониана можно найти в книге [25].

В пределе сильного перекрытия, когда параметр (4.81) велик  $\kappa \geq 1$ , антиэрмитовский член (4.91) играет ведущую роль в пропагаторе (4.86), и основное взаимодействие между внутренними состояниями происходит через континуум. Подобно сверхизлучению из-за связи кубитов через общее поле излучения, это взаимодействие приводит к реструктуризации ширин. В результате несколько состояний приобретают значительную часть полной суммарной ширины, а оставшиеся (*захваченные*) состояния возвращаются к режиму без перекрытия. В сечении реакции широкое состояние видно как огибающая узких резонансов. Число широких состояний равно числу ненулевых собственных значений матрицы  $\tilde{H}$ , которое равно числу открытых каналов. В этом пределе решение динамической задачи аналогично тому, как это делалось для эрмитовского факторизованного гамильтониана в разд. I.10.8, но в данном случае коллективные состояния концентрируют распадную ширину, а не силу мультипольных переходов (сдвиг вдоль мнимой оси в комплексной плоскости энергий). Контригра случайных эрковских флуктуаций против когерентной сверхизлучательной динамики играет важную роль в процессах передачи сигналов через различные квантовые системы. Детальное обсуждение этих вопросов выходит за рамки книги.

## 4.10. Угловой момент и чётность

В нашем рассмотрении мы не учитывали вырождение из-за возможности иметь различные проекции углового момента. Полный угловой момент  $J$  в системе центра масс сохраняется и поэтому равен угловому моменту

промежуточного состояния («спину резонанса»)

$$J = J^a = J_r = J^b. \quad (4.92)$$

Проекция  $J_z = M$  полного углового момента на ось квантования также сохраняется. Состояния с различными  $M$  имеют одинаковую энергию, т. е. мы фактически имеем  $(2J + 1)$  вырожденных резонансных состояний с одинаковыми резонансными свойствами, которые не зависят от ориентации системы как целого.

Квантовое число  $M$  измеримо, так что процессы, соответствующие ортогональным состояниям с различными  $M$ , не интерферируют. В эксперименте без регистрации  $M$  и поляризационных состояний начальных частиц  $a$  (спин  $J_a$ ) и  $A$  (спин  $J_A$ ), мы должны суммировать по  $M$  и усреднять некогерентную сумму резонансных сечений для разных  $M$  по начальным проекциям. Это даёт

$$\sigma^{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{2J + 1}{(2J_a + 1)(2J_A + 1)} \left| \frac{A_r^b J A_r^{a*}}{E - E_{rJ} + (i/2)\Gamma_{rJ}} \right|^2, \quad (4.93)$$

где полный угловой момент  $J$  указан отдельно, в дополнение к другим квантовым числам  $r$  резонанса. Вводя парциальные ширины (4.89), получаем

$$\sigma^{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{2J + 1}{(2J_a + 1)(2J_A + 1)} \frac{\Gamma_{rJ}^b \Gamma_{rJ}^a}{(E - E_{rJ})^2 + \Gamma_{rJ}^2/4}. \quad (4.94)$$

Зависящий от спина статистический фактор здесь равен вероятности найти величину полного углового момента при векторном сложении  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_A$ , равную резонансному значению  $J$ .

Если мы не рассматриваем распады за счёт слабых взаимодействий, пространственная чётность  $\Pi$  также сохраняется. Она определяется внутренними чётностями частиц и чётностью волновой функции относительного движения, т. е. орбитальным моментом относительного движения в данном канале:

$$\Pi = \Pi_a \Pi_A (-)^{\ell_a} = \Pi_r = \Pi_b \Pi_B (-)^{\ell_b}. \quad (4.95)$$

#### 4.11. Узкий резонанс как составная система

В резонансе  $E = E_{rJ}$  сечения всех каналов выражаются простыми соотношениями, которые имеют очевидный вероятностный смысл:

$$\sigma^{ba} = \frac{4\pi}{k_a^2} \frac{2J + 1}{(2J_a + 1)(2J_A + 1)} \frac{\Gamma_{rJ}^b \Gamma_{rJ}^a}{\Gamma_{rJ}^2}, \quad (4.96)$$

будучи пропорциональными произведению вероятности захвата  $\Gamma_{rJ}^a/\Gamma_{rJ}$  и вероятности распада  $\Gamma_{rJ}^b/\Gamma_{rJ}$ . Тогда входной и выходной каналы *статистически независимы*. Конечно, это было изначально заложено в приближении изолированного резонанса (4.83).

Идея статистической независимости является главной в теории *составного ядра* (Н. Бор, 1936) или составной промежуточной системы в общем случае. Физически мы ожидаем справедливости такой картины, если резонанс достаточно долгоживущий, чтобы составная система могла достичь состояния, близкого к тепловому равновесию, когда память о входном канале теряется и распад в разные выходные каналы определяется статистически. Отметим, что в случае одноканального (упругого) рассеяния, парциальная и полная ширины совпадают и резонансное сечение не содержит никакой динамической информации; оно определяется, за исключением спиновых статистических факторов, начальной длиной волны  $\lambda_a \propto k_a^{-1}$ .

В окрестности изолированного резонанса все каналы  $a \rightarrow b$  демонстрируют одинаковое брейт—вигнеровское поведение (4.94). Отношение сечений для различных каналов есть просто отношение парциальных ширин

$$\frac{\sigma^{ba}}{\sigma^{ca}} = \frac{\Gamma_{rJ}^b}{\Gamma_{rJ}^c}. \quad (4.97)$$

Для данного входного канала  $a$  отношение сечений тогда равно (полное неупругое)/(упругое)

$$\frac{\sigma_{\text{inel}}}{\sigma_{\text{el}}} = \frac{\sum_{b \neq a} \sigma^{ba}}{\sigma^{aa}} = \frac{\sum_{b \neq a} \Gamma_{rJ}^b}{\Gamma_{rJ}^a} \equiv \frac{\Gamma_{rJ} - \Gamma_{rJ}^a}{\Gamma_{rJ}^a}. \quad (4.98)$$

В терминах полного сечения это может быть записано (опуская очевидные индексы) как отношение вероятностей

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{tot}} \frac{\Gamma_{\text{el}}}{\Gamma}, \quad \sigma_{\text{inel}} = \sigma_{\text{tot}} \frac{\Gamma_{\text{inel}}}{\Gamma}, \quad \Gamma = \Gamma_{\text{el}} + \Gamma_{\text{inel}}. \quad (4.99)$$

Одинаковое положение пика в сечениях в разных каналах свидетельствует о том, что мы имеем дело с одним изолированным резонансом.

Этот подход может быть обобщён на учёт пороговых эффектов, важных для медленных частиц. В этих случаях парциальные и полные ширины не константы, а плавные функции энергии или волнового вектора в соответствующем канале. Рассмотрим, например, реакцию при низкой энергии  $\varepsilon_a$  во входном канале. Тогда, как мы знаем, упругая ширина в  $\ell$ -той парциаль-

ной волне должна зависеть от энергии  $\propto k_a^{2\ell+1} \propto \varepsilon_a^{\ell+1/2}$ . Поэтому можно определить не зависящую от энергии *приведённую* ширину  $\gamma_{rJ}^{a;\ell}$  согласно

$$\Gamma_{rJ}^{a;\ell} = \gamma_{rJ}^{a;\ell} \left( \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_r} \right)^{\ell+1/2}, \quad (4.100)$$

где  $\varepsilon_r^a = E_r - E_a^{\text{intr}}$  есть кинетическая энергия в резонансе. Поскольку в нашем подходе все каналы входят на равных основаниях, за исключением различия в плотности конечных состояний, которое эффективно учитывается фактором  $k_a^{-2} \propto \varepsilon_a^{-1}$ , подобная зависимость от энергии  $\propto \varepsilon_b^{\ell+1/2}$  появляется и в парциальной ширине испускания медленных частиц в  $\ell$ -той парциальной волне. Как мы помним из теории рассеяния, подавление высших парциальных волн идёт от центробежного барьера, и параметром малости является  $kR$ , где  $R$  характеризует радиус взаимодействия.

#### 4.12. Интерференция резонанса и потенциального рассеяния

Узкий резонанс соответствует квазистационарному состоянию, которое близко к связанному благодаря взаимодействиям внутри составной системы. На практике резонансы в сечении наложены на плавный фон. Плавная часть сечения обязана процессам, которые не влекут образования долгоживущих внутренних состояний. Слабая зависимость фона от энергии показывает, что соответствующие взаимодействия протекают на малых временных масштабах (*прямые процессы*). В более глубокой микроскопической теории это может рассматриваться как признак присутствия высокоэнергичных резонансов, от которых видны только низкоэнергетические хвосты, или очень широких (короткоживущих, таких как сверхизлучательных) возбуждённых состояний, которые теряют свой резонансный характер. Потенциальное рассеяние также может приводить к тем же конечным состояниям, что и распад узкого резонанса, и все эти процессы *интерферируют*.

Для простоты рассмотрим один  $s$ -волновой резонанс. Упругое рассеяние состоит из резонансной части и «потенциальной» части, которая включает все вклады с плавной зависимостью от энергии. Эти части должны складываться когерентно, на уровне *амплитуд*:

$$f_{\text{el}} = f_{\text{res}} + f_{\text{pot}}. \quad (4.101)$$

Упругое сечение содержит интерференционный вклад

$$\sigma_{\text{el}} = 4\pi |f_{\text{el}}|^2 = 4\pi |f_{\text{res}} + f_{\text{pot}}|^2. \quad (4.102)$$

Два вклада в (4.101) различимы по их энергетической зависимости; мы предполагаем, что резонансная часть  $f_{\text{res}}$  может быть распознана по её брейт—вигнеровской форме (4.93).

Разложение на резонансную и потенциальную части естественно возникает из феноменологического анализа  $S$ -матрицы, если последняя имеет резонансный полюс в комплексной плоскости энергии. Радиальная  $s$ -волновая функция в асимптотической области  $r > R$  входного канала  $a$  выражается, см. (2.16), с помощью матричного элемента  $S \equiv S_0^{aa}$  как

$$u(r) \propto e^{-ikr} - S e^{ikr}. \quad (4.103)$$

Зависящая от энергии величина  $S$  определяет оба, упругое (4.17) и полное неупругое (4.19), сечения. Полюса их аналитического продолжения на мнимую ось  $k = ik$  дают энергии возможных связанных состояний, см. разд. 4.4. Теперь мы ищем квазистационарные состояния, связанные с полюсами при комплексной энергии  $\mathcal{E}$ .

Если бы мы могли создать в реальности состояние с этой комплексной энергией, то соответствующий волновой вектор  $k$  был бы также комплексным. Для долгоживущего состояния  $\Gamma \ll E_0$ :

$$k = \sqrt{\frac{2\mu_a}{\hbar^2} \left( E_0 - \frac{i}{2}\Gamma \right)} \approx k_0 \left( 1 - i \frac{\Gamma}{4E_0} \right), \quad k_0 = \sqrt{\frac{2\mu_a E_0}{\hbar^2}}. \quad (4.104)$$

В полюсе  $S$  мы можем пренебречь первым членом в (4.103), который даёт падающую волну. Оставшаяся расходящаяся волна имеет растущую на больших расстояниях интенсивность

$$e^{ikr} \approx e^{ik_0 r} e^{(\mu_a \Gamma / 2\hbar^2 k_0) r}. \quad (4.105)$$

Эта ненормируемая функция описывает волну частицы, испущенной из нестабильного состояния и движущейся из начала координат со скоростью  $v = \hbar k_0 / \mu_a$ . Действительно, восстановив зависящий от времени фактор (4.58), мы имеем в точке комплексного полюса

$$u(r) \propto e^{ik_0 r} e^{-(i/\hbar)E_0 t} e^{(\Gamma/2\hbar)[(r/v)-t]} \quad (4.106)$$

волновой пакет, движущийся наружу со скоростью  $v$ .

В задаче рассеяния элементы  $S$ -матрицы должны находиться при сшивке внешней волновой функции (4.103) с реальным решением уравнения Шрёдингера при той же положительной энергии  $E$  внутри области взаимодействия  $r < R$ . Фактически мы должны знать только логарифмическую производную внутренней волновой функции на поверхности сшивки  $r = R$ . Удобно определить безразмерную логарифмическую производную

$$\lambda(E) = R \left( \frac{1}{u} \frac{du}{dr} \right)_{r=R}. \quad (4.107)$$

Предполагая эту функцию известной в точке  $r = R - 0$ , мы можем записать условие сшивки функции (4.103):

$$\lambda(E) = -ikR \frac{1 + Se^{2ikR}}{1 - Se^{2ikR}} \rightsquigarrow S = -e^{-2ikR} \frac{kR - i\lambda}{kR + i\lambda}. \quad (4.108)$$

Если бы не было неупругих каналов,  $\lambda(E)$  была бы действительной и уравнение (4.108) немедленно показало бы, что  $|S| = 1$ , как и должно быть в упругом рассеянии (2.2). В общем многоканальном случае  $\lambda(E)$  есть комплексная функция, которую можно разделить на действительную и мнимую части:

$$\lambda(E) = \lambda_1(E) - i\lambda_2(E) \rightsquigarrow S = -e^{-2ikR} \frac{(kR - \lambda_2) - i\lambda_1}{(kR + \lambda_2) + i\lambda_1}. \quad (4.109)$$

В присутствии поглощения (неупругие каналы)  $|S| < 1$ ; легко видеть, что в силу этого неравенства  $\lambda_2 > 0$ . Используя (4.17) и (4.19), выразим упругое и неупругое сечения как

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} |1 - S|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \left| e^{-2ikR} \frac{kR}{\lambda - ikR} - e^{-ikR} \sin kR \right|^2, \quad (4.110)$$

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2} (1 - |S|^2) = \frac{4\pi}{k^2} \frac{kR\lambda_2}{(kR + \lambda_2)^2 + \lambda_1^2}. \quad (4.111)$$

Глядя на выражение (4.110), естественно сделать разложение (4.101,4.102), вводя *амплитуду потенциального рассеяния*, в согласии со стандартным определением (3.12),

$$f_{\text{pot}} = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0, \quad \delta_0 = -kR. \quad (4.112)$$

Фаза рассеяния  $\delta_0$  была бы единственным эффектом рассеяния на непроницаемой сфере радиуса  $R$ , см. (2.41). В нашем случае возможно проникновение в область взаимодействия, что и есть источник появления квазистационарных состояний, скрытых в *резонансной* части амплитуды рассеяния

$$f_{\text{res}} = \frac{1}{k} e^{2i\delta_0} \frac{kR}{\lambda - ikR}. \quad (4.113)$$

Заметим, что  $S$ -матрица потенциального рассеяния,  $S_{\text{pot}} = e^{2i\delta_0}$ , входит в резонансную амплитуду как дополнительный фактор, потому что рассеяние на квазистационарном уровне с необходимостью включает свободное движение вне сферы взаимодействия, которое связано с фазой рассеяния  $\delta_0 = -kR$ .

Для нахождения условий существования узкого резонанса рассмотрим область низких энергий,  $kR \ll 1$ , в которой доминирует  $s$ -волновое рассеяние. Резонансная часть (4.113) может быть значительной, только если комплексная величина  $\lambda$  тоже мала,  $|\lambda| \sim kR$ . Мы бы имели точный резонанс (полнос амплитуды  $f_{\text{res}}$ ), если бы было  $\lambda_1 = 0$ ,  $\lambda_2 = -kR$ . Как мы уже обсуждали, это соответствовало бы квазистационарному состоянию, достигаемому в упругом рассеянии. Однако это невозможно в физической области в присутствии неупругих каналов, когда должно быть  $\lambda_2 \geq 0$ . Тем не менее, для малых  $\lambda_2 > 0$  мы всё ещё можем видеть узкий резонанс. Действительно, пусть  $E_0$  есть реальная часть энергии, где  $\lambda_1(E_0) = 0$ . В окрестности этой энергии

$$\lambda_1(E) \approx \left( \frac{d\lambda_1}{dE} \right)_{E=E_0} (E - E_0) + \dots \equiv \lambda'_1 (E - E_0) + \dots \quad (4.114)$$

Предполагая, что  $\lambda'_1 < 0$ , мы можем определить ширины следующим образом, сравните с (4.99):

$$\Gamma_{\text{el}} = -\frac{2kR}{\lambda'_1}, \quad \Gamma_{\text{inel}} = -\frac{2\lambda_2}{\lambda'_1}, \quad \Gamma = \Gamma_{\text{el}} + \Gamma_{\text{inel}}. \quad (4.115)$$

Тогда резонансная часть упругой амплитуды (4.113) приобретает брейт–вигнеровский вид

$$f_{\text{res}} = -\frac{1}{k} e^{2i\delta_0} \frac{(1/2)\Gamma_{\text{el}}}{E - E_0 + (i/2)\Gamma} \quad (4.116)$$

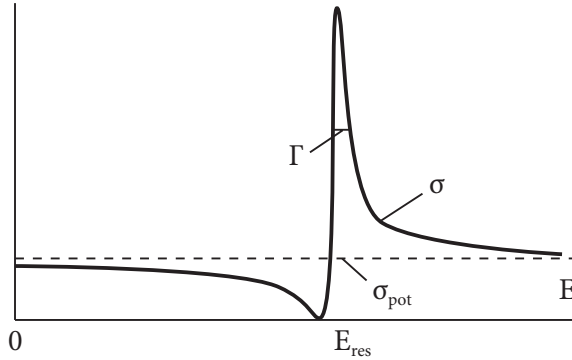


Рис. 4.4. Интерференционная картина потенциального и резонансного рассеяния

с полюсом в комплексной плоскости. Это немедленно даёт брейт—вигнеровское резонансное выражение для неупругого сечения (4.111)

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2} \frac{\Gamma_{\text{el}}\Gamma_{\text{inel}}}{(E - E_0)^2 + (1/4)\Gamma^2}, \quad (4.117)$$

которое совпадает с (4.94) после суммирования по всем неупругим каналам  $b$  (здесь мы не учитываем спиновых факторов).

В упругом канале сечение даётся интерференцией (4.102); в непосредственной близости к резонансу во многих случаях можно пренебречь потенциальным рассеянием и вернуться к результатам разд. 4.6. Присутствие потенциальной части, плавно меняющейся с энергией, искажает форму брейт-вигнеровского резонанса. Из-за интерференции форма теряет симметрию относительно резонансной энергии  $E_0$ . Рис. 4.4 показывает типичную наблюдаемую картину. Легко видеть, что упругая фаза рассеяния для резонанса, интерферирующего с гладким потенциальным рассеянием, имеет универсальную энергетическую зависимость вблизи резонансной энергии

$$\delta = \bar{\delta} - \arctan \frac{\Gamma}{2(E - E_0)}. \quad (4.118)$$

Если  $\bar{\delta}$  есть фаза потенциального рассеяния вдали от резонанса (её изменение мало внутри ширины резонанса), то полная фаза меняется на  $\pi$  при прохождении резонанса.

**Дополнительная литература:** [2], [4], [8], [18], [20], [26], [27], [28]

Квантовомеханически решения с отрицательной энергией внутренне присущи любой релятивистской теории. Даже если мы запретим их вначале, квантовые взаимодействия неизбежно восстановят их позже.

*М. Каку. «Квантовая теория поля»*

## Глава 5

### На пути к релятивистской квантовой механике

#### 5.1. Ограничения подхода

Эта глава посвящена релятивистскому обобщению квантовой теории. Здесь мы ограничиваемся *одночастичной проблемой*, рассматривая свободное движение отдельной частицы и движение во внешнем электромагнитном поле.

Как отмечалось в разд. I.5.10, одночастичное описание имеет ограниченную применимость. Внешнее поле должно быть существенно гладким в пространстве и во времени. Если оценивать количественно, то характерный масштаб  $R$  или характерное время  $t$  заметных изменений поля не могут быть слишком малыми. В соответствии с (I.5.85), пространственный масштаб  $R$  должен превышать комптоновскую длину волны частицы, а  $t$  должно быть больше характерного времени

$$R > \frac{\hbar}{mc}, \quad t > \frac{\hbar}{mc^2}. \quad (5.1)$$

Если неравенства (5.1) нарушаются и поле слишком сильно локализует частицу в пространстве и времени, импульс и энергия частицы приобретают слишком большую неопределенность:

$$\Delta p > mc, \quad \Delta E > mc^2. \quad (5.2)$$

В этом случае уже нельзя гарантировать *одночастичный* характер движения.

Удобно перейти к Фурье-компонентам поля. Тогда неравенство (5.1) можно сформулировать как ограничение на волновой вектор  $k$  и частоту

$\omega$  поля:

$$k \simeq \frac{1}{R} < \frac{mc}{\hbar}, \quad \omega \simeq \frac{1}{t} < \frac{mc^2}{\hbar}. \quad (5.3)$$

В противном случае энергия  $\hbar\omega$ , поглощаемая от поля, будет порядка массы частицы, что приводит к рождению частиц и неопределенности в их числе. Эти ограничения, имеющие релятивистскую природу, явно выражаются через скорость света  $c$ .

## 5.2. Релятивистские единицы

Все уравнения сильно упрощаются, если записать их в подходящих единицах. В релятивистской области наиболее удобно положить  $\hbar = 1$  и  $c = 1$ . Тогда пространственные переменные и время имеют одинаковую размерность («длины»), в то время как импульс, энергия, масса, частота и волновой вектор имеют одинаковую размерность обратной длины. Например, комптоновская длина волны частицы с массой  $m$  есть  $\lambda = \hbar/mc \Rightarrow 1/m$ . Очевидно, угловой момент, действие и скорость  $v$  теперь безразмерны; для любого физического сигнала  $v < 1$ .

Элементарный заряд  $e$  также становится безразмерным, а постоянная тонкой структуры  $\alpha = e^2 \approx 1/137$ . В любое время можно вернуться к «нормальным» единицам, вставляя обратно  $\hbar$  и  $c$  и вспоминая численное значение

$$\hbar c \approx 197 \text{ МэВ} \cdot \text{ф}. \quad (5.4)$$

Повсюду в этой главе мы используем почти исключительно релятивистские единицы. Отдельные использования других единиц отмечены явно.

## 5.3. Преобразования Лоренца

Лоренц-инвариантность является необходимым требованием для того, чтобы теория была применима в релятивистской области. Во всех уравнениях различные члены должны иметь одинаковые трансформационные свойства при преобразованиях Лоренца из одной инерциальной системы отсчёта в другую. Лишь в этом случае уравнения будут *ковариантны*, т. е. будут сохранять свой вид в соответствии с идеей эквивалентности всех инерциальных систем отсчёта в специальной теории относительности.

Пространственно-временные координаты события образуют *4-вектор*

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (t, \mathbf{r}). \quad (5.5)$$

Стандартное преобразование Лоренца к системе, движущейся со скоростью  $v$  вдоль оси  $x$  по отношению к исходной системе, выражает координаты *того же события* в новой системе  $x^\mu \rightarrow x'^\mu$ :

$$x'^0 = \gamma(x^0 - vx^1), \quad x'^1 = \gamma(x^1 - vx^0), \quad x'^2 = x^2, \quad x'^3 = x^3, \quad (5.6)$$

где релятивистский фактор ( $\gamma \geq 1$ ) определяется выражением

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}}. \quad (5.7)$$

Обратное преобразование описывается теми же формулами (5.6) с  $v \rightarrow -v$ .

Аналогично инвариантности  $\mathbf{r}^2 = \sum_{i=1,2,3} (x^i)^2$  относительно евклидовых вращений, преобразование Лоренца сохраняет релятивистский *интервал* между двумя событиями. Если одно событие задано в качестве начала отсчета пространственно-временного континуума,  $x^\mu = 0$ , а второе имеет координаты (5.5), интервал между ними равен  $\sqrt{x^2}$ , где

$$x^2 \equiv (x^0)^2 - \sum_{i=1,2,3} (x^i)^2 = t^2 - \mathbf{r}^2. \quad (5.8)$$

Инвариантность этого выражения непосредственно следует из (5.6),

$$x'^2 = x^2. \quad (5.9)$$

Величина (5.8) может рассматриваться как *норма* 4-вектора  $x^\mu$  в *пространстве Минковского*. Будем надеяться, что не будет путаницы обозначения нормы  $x^2$  со второй пространственной координатой в уравнении (5.5); в реальности нам не понадобится последнее обозначение, за исключением случая вектора импульса, определённого в следующем разделе.

В противоположность евклидовым векторам, норма в пространстве Минковского не является положительно определённой. Векторы  $x^\mu$  с  $x^2 > 0$  являются *временеподобными*, а векторы  $x^2 < 0$  — *пространственноподобными*. Только события разделенные временеподобными интервалами могут быть связаны физическими сигналами. В произвольной лоренцевской системе отсчёта их упорядоченность во времени сохраняется. Нулевой интервал  $x^2 = 0$  соответствует сигналу с  $v = 1$  (распространение фронта световой волны, см. задачу П.13.3). Временеподобные события с  $t > 0$  располагаются в верхней («будущее») половине внутренней области светового конуса, образованного мировыми линиями  $x^2 = 0$  светового сигнала. Они не могут быть переданы в нижнюю («прошлое») область, соответствующую  $t < 0$ , с помо-

щью непрерывного преобразования Лоренца. Следовательно, *причинность* гарантирована, и события могут быть причинно связанными. Пространственноподобные интервалы разделяют события, которые не могут быть связаны каким-либо физическим сигналом с  $v \leq 1$ . Подобные события не являются причинно связанными; их упорядоченность во времени зависит от системы отсчёта, и существует система, в которой они одновременны.

#### 5.4. Энергия и импульс

Переменные с тем же самым законом преобразования Лоренца, что и координаты (5.6), называются *контравариантными* 4-векторами. Пометим их координаты верхними индексами,  $\mu = 0$  (временная компонента) и  $\mu = 1, 2, 3$  (пространственные компоненты). Другой пример даёт вектор энергии-импульса

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) \equiv (\varepsilon, \mathbf{p}). \quad (5.10)$$

Квадрат нормы Минковского

$$p^2 = (p^0)^2 - \sum_{i=1,2,3} (p^i)^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2, \quad (5.11)$$

разумеется, является инвариантом преобразования Лоренца. Он определяет *инвариантную массу*  $m$  объекта:

$$p^2 = m^2. \quad (5.12)$$

В системе покоя объекта ( $\mathbf{p} = 0$ ) его масса совпадает с полной энергией  $\varepsilon$ . В произвольной системе координат *дисперсионное соотношение* выражает энергию частицы как функцию её импульса

$$\varepsilon^2 = \mathbf{p}^2 + m^2. \quad (5.13)$$

Физическая частица обладает вещественной массой и времениподобным 4-импульсом,  $p^2 > 0$ . Более того, устойчивая система имеет основное состояние с минимально возможной энергией. Появление новой частицы увеличивает энергию системы; иначе система была бы неустойчивой по отношению к генерации бесконечного множества частиц. Это означает, что физический корень дисперсионного соотношения (5.13) есть

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}. \quad (5.14)$$

Исключительный случай нулевого 4-импульса,  $p^2 = 0$ , соответствует *безмассовым* частицам. Такая частица в любой системе отсчета движется со скоростью света и

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = |\mathbf{p}|. \quad (5.15)$$

В заданной системе отсчета энергия (5.14) может рассматриваться как гамильтониан свободной классической частицы. Гамильтоново уравнение движения определяет скорость

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{\varepsilon}. \quad (5.16)$$

В терминах скорости энергия и импульс частицы массы  $m$  выражаются как

$$\varepsilon = \gamma m, \quad \mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}, \quad (5.17)$$

где релятивистский фактор  $\gamma$  был определен в (5.7). В случае медленного движения  $v \ll 1$  и энергия частицы (5.14) может быть представлена как ее масса с нерелятивистской кинетической энергией и релятивистскими поправками, см. уравнение (II.8.36):

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} \approx m + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3} + \dots \quad (5.18)$$

В квантовой механике то же выражение (5.16) определяет *групповую скорость*, разд. I.5.4, узкого волнового пакета, образованного плоскими волнами,

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \text{const } e^{-i(\varepsilon_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p} \mathbf{r})} \quad (5.19)$$

и описывающего свободное движение этих частиц. Обычно групповая скорость может быть ассоциирована с распространением физического сигнала (за исключением областей аномальной дисперсии в средах). Как видно из (5.14) и (5.16),  $|\mathbf{v}| \leq 1$ , равенство имеет место для безмассовых частиц.

## 5.5. Тензоры и обозначения

Правило (5.8, 5.11) образования Лоренц-инвариантов может быть обобщено для тензоров высшего ранга с помощью *метрического тензора* в пространстве Минковского. Это позволяет вводить весьма удобные тензорные обозначения. Заметим, что в нашей системе обозначений мы не используем мнимые компоненты времени 4-векторов, как это делают многие авторы.

Определим метрический тензор  $g_{\mu\nu}$  как матрицу  $4 \times 4$  ( $\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ ), которая диагональна, и её ненулевые матричные элементы равны

$$g_{00} = 1, \quad g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1. \quad (5.20)$$

Иногда говорят, что метрический тензор имеет *сигнатуру*  $(+, -, -, -)$ . Для произвольного контравариантного 4-вектора  $a^\nu = (a^0, \mathbf{a})$  метрический тензор (5.20) определяет его *ковариантный* аналог, маркируемый нижними, а не верхними индексами

$$a_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu \quad (5.21)$$

таким образом, что  $a_0 = a^0$ ,  $a_i = -a^i$ . Греческие индексы всегда пробегают значения 0,1,2,3 в то время, как латинские имеют значения 1,2,3. С этого момента мы будем опускать знак суммирования в выражениях типа (5.21), используя стандартное правило, что по повторяющимся индексам (один верхний, другой нижний) подразумевается суммирование. Например, вместо (5.21) мы будем писать  $a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$ .

С метрическим тензором (5.20) скалярное произведение двух 4-векторов  $a$  и  $b$  определяется как

$$(ab) \equiv a \cdot b = a^0 b^0 - \sum_{i=1,2,3} a^i b^i = a^\mu g_{\mu\nu} b^\nu = a^\mu b_\mu = a_\nu b^\nu. \quad (5.22)$$

Ранее обсуждавшиеся величины  $x^2$  и  $p^2$  являются скалярными квадратами  $x_\mu x^\mu$  и  $p_\mu p^\mu$  соответственно. Очевидно, что любое скалярное произведение (5.22) является лоренцевым инвариантом.

Контравариантные *4-тензоры* ранга  $r$  задаются наборами  $4^r$  компонент  $T^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_r}$ , которые при преобразовании Лоренца трансформируются как произведения контравариантных 4-векторов  $a^{\mu_1} a^{\mu_2} \dots a^{\mu_r}$ . Умножение на  $g_{\mu_l \nu_l}$  с суммированием по  $\mu_l$ , где  $l$  — один из  $1, \dots, r$ , образует смешанный тензор с (контравариантными) верхними индексами  $\{\mu_i\}$ , в которых  $\mu_l$  отсутствует, и (ковариантным) нижним индексом  $\nu_l$ . Таким образом можно получить тензоры, которые контравариантны по  $s$  индексам из набора  $1, \dots, r$ , и ковариантны по оставшимся  $r - s$  индексам, вплоть до полностью ковариантного тензора  $T_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_r}$ .

Для каждой пары контравариантных и ковариантных индексов возможна операция *свёртки*, позволяющая преобразовать исходный тензор  $T_{(q)}^{(p)}$  ранга  $r = p + q$  в новый тензор  $T_{(q-1)}^{(p-1)}$  ранга  $r - 2$ , который является суммой  $T_{\dots \mu \dots}^{\dots \mu \dots}$ . Таким образом, для тензора второго ранга  $T^{\mu\nu}$  свёртка приводит к

скаляру (инвариантный тензор ранга 0)

$$T^{\mu\nu} \Rightarrow g_{\lambda\nu} T^{\mu\nu} = T_{\lambda}^{\mu} \Rightarrow T_{\mu}^{\mu}. \quad (5.23)$$

Другими словами, свёртка выполняется перемножением  $g_{\mu\nu} T^{\mu\nu} = T_{\mu}^{\mu}$ .

Для самого метрического тензора определим контравариантный двойник  $g^{\mu\nu}$  как тензор, обратный к  $g_{\mu\nu}$ . Численно он совпадает с первоначальным тензором (5.20),  $g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$ . Смешанный тензор в этом случае есть просто единичный символ Кронекера  $\delta_{\nu}^{\mu}$  со всеми диагональными элементами, равными 1, и нулевыми недиагональными элементами:

$$g_{\lambda\nu} g^{\mu\nu} = \delta_{\lambda}^{\mu}. \quad (5.24)$$

Метрический тензор инвариантен по отношению к преобразованиям Лоренца.

В качестве примера рассмотрим операторы *градиента* ( $\partial/\partial t$  и  $\nabla$ ). Стандартное соответствие между вектором энергии-импульса (5.10) и квантовыми операторами (отмеченными шляпкой при необходимости) — это:

$$p^0 = \varepsilon \Rightarrow \hat{p}^0 = i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i \nabla. \quad (5.25)$$

Так как  $p^0$  и  $\mathbf{p}$  образуют контравариантный вектор (5.10), то

$$p^{\mu} \Rightarrow \hat{p}^{\mu} = i \left( \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \equiv i \partial^{\mu}, \quad (5.26)$$

что определяет *контравариантный градиент*

$$\partial^{\mu} = \frac{\partial}{\partial x_{\mu}}, \quad (5.27)$$

образуемый частными производными по отношению к *ковариантным* координатам  $x_{\mu} = (t, -\mathbf{r})$ . Аналогично этому, *ковариантный градиент*

$$\partial_{\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) \equiv \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \quad (5.28)$$

образован производными по отношению к контравариантным координатам  $x^{\mu}$ . Во всех уравнениях различные члены должны иметь одинаковую тензорную структуру и те же свободные индексы в тех же позициях (верхних или нижних).

Общее преобразование Лоренца (конкретный пример дан в (5.6)) является линейным преобразованием  $\Lambda$  контравариантных координат 4-вектора, и может быть записано в матричной форме:

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu. \quad (5.29)$$

Здесь положения индексов определяются контравариантностью вектора  $x^\mu$ . В матрицах  $M^\mu_\nu$  верхний индекс  $\mu$  нумерует строку, а нижний индекс  $\nu$  соответствует столбцу. Таким образом, для преобразования Лоренца вдоль оси  $x$ , уравнение (5.6), матрица преобразования имеет вид

$$\Lambda^\mu_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v & 0 & 0 \\ -\gamma v & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(1 - v\sigma_x) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Второе представление использует матрицу  $4 \times 4$ , записанную с использованием блоков  $2 \times 2$ , которые формально выражаются через матрицы Паули.

Преобразование ковариантных компонент видно из простой цепочки равенств,

$$x'_\mu = g_{\mu\lambda} x'^\lambda = g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda_\sigma x^\sigma = \Lambda_{\mu\sigma} g^{\sigma\nu} x_\nu = \Lambda_\mu^\nu x_\nu. \quad (5.31)$$

Здесь используются правила поднятия и опускания компонент тензора. Матрицы в (5.31) и (5.30) отличаются знаком скорости:

$$\Lambda_\mu^\nu = \begin{pmatrix} \gamma(1 + v\sigma_x) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

*Группа Лоренца* является группой преобразований, сохраняющих норму векторов в пространстве Минковского:

$$(x'y') = x'^\mu y'_\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu y_\sigma \Lambda^\sigma_\mu = (xy); \quad (5.33)$$

это подразумевает, что матрицы группы должны удовлетворять соотношению

$$\Lambda_\mu^\sigma \Lambda^\mu_\nu = \delta^\sigma_\nu. \quad (5.34)$$

Легко проверить, что, как мы уже отмечали, метрический тензор инвариантен относительно преобразования Лоренца. В самом деле, тензоры

преобразуются как произведения векторов (5.29)

$$g^{\mu\nu} \rightarrow g'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\sigma \Lambda^\nu_\rho g^{\sigma\rho} = \Lambda^{\mu\rho} \Lambda^\nu_\rho, \quad (5.35)$$

где на последнем шаге используется правило поднятия и опускания индексов. Опуская верхний индекс  $\mu$  (см. (5.34)), получим

$$g'^{\mu\nu} = \Lambda^\rho_\tau \Lambda^\nu_\rho g^{\mu\tau} = \delta^\nu_\tau g^{\mu\tau} = g^{\mu\nu}. \quad (5.36)$$

Мы не будем изучать здесь общую структуру группы Лоренца, см. [29].

## 5.6. Уравнение Клейна—Гордона

Нерелятивистское уравнение Шрёдингера для свободного движения может быть «выведено» подстановкой квантовых операторов (5.25) для энергии  $\varepsilon$  и импульса  $\mathbf{p}$  в нерелятивистское дисперсионное соотношение  $\varepsilon = \mathbf{p}^2/2m$ . Плоские волны (5.19) образуют полный набор решений. Произвольное решение может быть представлено суперпозицией плоских волн с амплитудами, определенными Фурье-разложением исходных функций  $\Psi(0, \mathbf{r})$ .

Соответствующий релятивистский аналог должен иметь решение для плоской волны с определенными импульсом и энергией, связанными *релятивистским законом дисперсии*, (5.13), который включает массу покоя. В отличие от уравнения Шрёдингера, производные по времени и пространству должны входить одинаковым образом, чтобы гарантировать Лоренц-ковариантность. Этого можно достичь, если использовать операторную подстановку (5.25)

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Psi = [(-i\nabla)^2 + m^2] \Psi, \quad (5.37)$$

или, в явной Лоренц-инвариантной форме (сравните с неоператорным выражением (5.12)),

$$\hat{p}^2 \Psi \equiv -\partial^2 \Psi = m^2 \Psi. \quad (5.38)$$

Здесь 4-вектор  $\hat{p}^\mu = i\partial^\mu$  является 4-градиентом (5.26), а дифференциальный оператор второго порядка в уравнении (5.38) — это *оператор  $\partial^2$  Алампера*

$$\partial^2 \equiv \square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2. \quad (5.39)$$

Этот оператор является скалярным квадратом (5.22) вектора  $\partial^\mu$ , который дает Лоренц-инвариантное 4-мерное обобщение трехмерного оператора Лапласа. Заметим, что вследствие второго порядка  $\Psi$  и  $\Psi^*$  являются решениями того же самого уравнения (инвариантность по отношению к обращению времени свободного релятивистского движения). Нужно также упомянуть, что из-за производных второго порядка по времени заданная начальная волновая функция  $\Psi(t_0)$  не полностью определяет будущую эволюцию системы, для этого необходимо знать также начальное значение производной  $\dot{\Psi}(t_0)$ . Это связано с конкретной формой плотности вероятности, которая, вообще говоря, включает производную по времени волновой функции, см. ниже уравнение (5.46).

В (5.37) мы «вывели» уравнение *Клейна—Гордона—Фока*, или просто уравнение *Клейна—Гордона* (УКГ), которое является основным релятивистским волновым уравнением для любой свободной частицы. Это скалярное уравнение для однокомпонентной волновой функции  $\Psi(x)$ . Для *бесспиновых* частиц это единственное волновое уравнение. Волновые функции для частиц с ненулевым спином — *многокомпонентные* объекты. Их компоненты определяют амплитуды различных скрытых состояний, связанных с внутренней структурой. Соответствующие волновые уравнения описывают динамику этих компонент и, следовательно, они более сложны, чем УКГ. Однако дисперсионное соотношение для частицы в целом по-прежнему задается соотношением (5.13). Следовательно, даже в этом случае волновая функция свободного движения должна быть решением УКГ. По построению, отыскивая решение (5.38) как собственное состояние оператора  $\hat{p}$ ,

$$\Psi(x) \equiv \Psi(t, \mathbf{x}) = \text{const} \cdot e^{-i(p \cdot x)} = \text{const} \cdot e^{-i(\varepsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}, \quad (5.40)$$

где  $p^\mu = (\varepsilon, \mathbf{p})$  — собственное значение  $\hat{p}^\mu$ , мы находим желаемое дисперсионное соотношение (5.13) между  $\varepsilon$  и  $\mathbf{p}$ .

Другие виды решений соответствуют полю, создаваемому источником частиц, которые описываются УКГ. Пусть, например, тяжелая точечная частица расположена в начале координат. В модели нуклона сильные взаимодействия создают *пионное поле* вокруг источника. Реальные пионы с массой  $m_\pi$  удовлетворяют УКГ, но в поле, создаваемом нуклонами, кванты виртуальны. *Статическое* сферически симметричное решение для пионного поля должно иметь сингулярность в центре, как в электростатическом случае. Такое решение имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} e^{-r/\lambda_\pi}, \quad (5.41)$$

где  $\lambda_\pi = 1/m_\pi$ , или  $\hbar/m_\pi c$  в обычных единицах, есть комптоновская длина волны пиона. Поле экспоненциально падает на расстоянии  $\sim \lambda_\pi$  в соответствии с простейшими оценками (см. задачу I.5.15). Пион как легчайшая частица, участвующая в сильных взаимодействиях (*адрон*), определяет диапазон ядерных сил (см. рис. I.5.12). На меньших расстояниях силы определяются более тяжелыми мезонами с меньшей комптоновской длиной волны. В пределе, когда массой пиона можно пренебречь, *потенциал Юкавы* (5.41), см. задачу I.1.8, переходит в обычный кулоновский потенциал точечного заряда, когда силы переносятся безмассовыми частицами (фотоны в электродинамике).

### 5.7. Сохранение тока

Сохранение вероятности является необходимым требованием к теории. Такие свойства, *локальные законы сохранения*, выражаются уравнениями того же типа, что и уравнение непрерывности (I.2.11). В релятивистском случае мы рассматриваем *векторное поле тока*

$$j^\mu(x) = (j^0(x), \mathbf{j}(x)), \quad (5.42)$$

зависящее от координат  $x = (t, \mathbf{r})$ , где  $j^0(x) = \rho(x)$  — плотность сохраняющейся величины. В соответствии с уравнением (I.2.12) сохраняющаяся константа движения является объёмным интегралом временной компоненты тока по всему пространству:

$$Q = \int d^3x j^0. \quad (5.43)$$

Ток, удовлетворяющий уравнению непрерывности, называется *сохраняющимся током*. Электрический ток сохраняется, поскольку полный электрический заряд является точным интегралом движения. Другие интегралы движения могут генерировать свои собственные сохраняющиеся токи.

Вводя 4-вектор градиента (5.26), перепишем уравнение непрерывности как  $\partial^0 j^0 - (-\nabla \cdot \mathbf{j}) = 0$ . Это не что иное, как инвариантное скалярное произведение (5.22) 4-градиента и 4-тока (5.42), или 4-дивергенция тока,

$$\partial^\mu j_\mu \equiv \partial_\mu j^\mu = 0. \quad (5.44)$$

В более общих случаях возникают сохраняющиеся тензоры более высоких рангов, удовлетворяющие уравнению

$$\partial_\mu T^{\alpha \dots \mu \dots \omega} = 0. \quad (5.45)$$

Тогда все компоненты объемного интеграла  $\int d^3x T^{\alpha \dots 0 \dots \omega}$  являются интегралами движения. Сохранение нерелятивистского тока (разд. I.7.3) следует из уравнения Шрёдингера для свободного движения и для движения в любом действительном внешнем потенциале  $U(t, \mathbf{r})$ . Этот закон сохранения эквивалентен унитарности — сохранению полной вероятности всех возможных экспериментов, выполняемых с частицей. Однако переменные  $\rho$ , уравнение (I.2.5), и  $\mathbf{j}$  из уравнения (I.7.54), не образуют 4-вектор, так как описание, очевидно, не является Лоренц-ковариантным.

Определим 4-ток для УКГ как релятивистское обобщение шрёдингеровского тока вероятности (I.7.54):

$$j^\mu(x) = \frac{i}{2m} [\Psi^* (\partial^\mu \Psi) - (\partial^\mu \Psi^*) \Psi]. \quad (5.46)$$

Легко проверить, что этот ток сохраняется. Уравнение (5.44) удовлетворяется, поскольку в выражении  $\partial_\mu j^\mu$  члены с произведением градиентов взаимно уничтожаются, в то время как члены с  $\partial^2$  уничтожаются в силу УКГ для  $\Psi$  и  $\Psi^*$ .

Релятивистский ток (5.46) можно представить как 4-градиент фазы, также как в (I.7.61). Он исчезает для вещественных полей  $\Psi = \Psi^*$ , подобно тому, как это было в случае *пространственных* компонент тока  $\mathbf{j}$  в нерелятивистской задаче. Однако *временная* компонента в (5.46), очевидно, ведет себя не так, как в нерелятивистском случае (I.2.5). Чтобы понять разницу, вычислим ток (5.46) для плоской волны (5.40). Это дает, в полной аналогии с шрёдингеровским случаем, см. уравнения (I.2.27, I.2.33),

$$j^\mu = \frac{p^\mu}{m} |\Psi|^2. \quad (5.47)$$

Временная компонента тока (5.46) равна

$$j^0 = \rho = \frac{\varepsilon}{m} |\Psi|^2. \quad (5.48)$$

Из (5.17) видно, что разница с нерелятивистским случаем обусловлена  $\gamma$ -фактором (5.7),  $\gamma = \varepsilon/m$ . В системе отсчёта частицы  $\varepsilon \rightarrow m$ , и (5.48) сводится к (I.2.5). Это приближенно справедливо и для медленного движения вплоть до поправок  $\sim p^4$  к кинетической энергии (5.18). В системе отсчёта, в которой частица движется со скоростью  $v$ , имеет место лоренцевское сокращение длины вдоль направления движения на величину  $1/\gamma$ . Чтобы сохранить значение сохраняющейся величины, плотность должна

возрастать на множитель  $\gamma = \varepsilon/m$ . Это то, что мы получили в уравнении (5.48). Важно, что плотность — это временная компонента 4-вектора, а не лоренцевский скаляр.

## 5.8. Частицы и античастицы

Вследствие линейности УКГ (5.38) любая суперпозиция плоских волн (5.40) с правильным соотношением (5.13) между энергией и импульсом снова является решением УКГ. И наоборот, плоские волны образуют полный набор, так что любое решение УКГ может быть представлено их суперпозицией.

Однако дисперсионное соотношение (5.13), выведенное из УКГ, квадратично и разрешает оба знака для  $\varepsilon$ , в противоположность «нормальному» физическому требованию положительности энергии (5.14). С другой стороны, решения с  $\varepsilon < 0$  не могут быть отвергнуты как нефизические, поскольку это может разрушить *полноту* решений для плоских волн и нарушить принцип суперпозиции. Следует заключить, что такие решения допустимы, но  $\varepsilon < 0$  не может интерпретироваться как энергия частицы.

Отметим, что сохраняющаяся плотность (5.48) отрицательна для решений с отрицательной «энергией». Следовательно, невозможно интерпретировать эту плотность как плотность вероятности, как это было сделано в нерелятивистской квантовой механике. Но можно интерпретировать сохраняющуюся величину как некий *заряд* такой, что для решений в виде плоской волны знаки для положительной и отрицательной  $\varepsilon$  противоположны.

Таким путём мы приходим к идее *античастиц*, которые описываются состояниями, удовлетворяющими тому же самому уравнению, но с  $\varepsilon < 0$ . Любой сохраняющийся заряд принимает противоположные значения для частиц и античастиц. Для вещественного поля  $j^\mu = 0$ ; отсутствие сохраняющихся зарядов делает в этом случае частицы тождественными их античастицам (*нейтральное поле*).

Для  $\varepsilon < 0$  положительная величина  $-\varepsilon = |\varepsilon|$  должна интерпретироваться как энергия античастицы. Иногда всё ещё удобно говорить о положительной и отрицательной «энергиях», имея в виду различные решения УКГ. Для  $|\varepsilon| \geq m$  в случае массивного поля,  $m \neq 0$ , эти классы решений разделены *энергетической щелью*  $\Delta\varepsilon = 2m$  (верхний и нижний континуум). Существование античастиц в некотором смысле является следствием лоренцевской инвариантности. Попытка обойти проблему знака энергии выполнением квантования (5.25) в уравнении (5.14) вместо (5.13) привела бы к уравнению

с производной по времени первого порядка, но с пространственными производными до бесконечного порядка, которые возникают из-за разложения квадратного корня в (5.14).

Интерпретация в терминах частиц и античастиц с положительными энергиями, но с противоположными зарядами, получает бóльшую ясность в квантовой теории поля. После *вторичного квантования*, глава 11, поле  $\Psi(x)$  становится оператором в *пространстве Фока*. Это пространство объединяет все состояния гильбертовых пространств с произвольным числом частиц и античастиц.  $\Psi$ -оператор уничтожает частицы и создает античастицы, уменьшая в обоих случаях заряд системы. Соответствующие члены в разложении плоской волны  $\Psi$ -оператора имеют вид (5.40) с положительной и отрицательной  $\varepsilon$  соответственно. Тогда в обоих случаях  $\varepsilon$  есть разность энергий  $E_i - E_f$  между начальным и конечным состояниями системы с числом частиц в конце  $N_f = N_i \mp 1$ . Такая формулировка близка к квантованию электромагнитного поля (разд. II.13.3).

Для того чтобы увидеть, что понятия частицы и античастицы непротиворечивы в простейшем случае ненулевого заряда, а именно электрического заряда, мы должны обобщить УКГ, чтобы описать не только свободное движение, но и движение во внешнем электромагнитном поле.

## 5.9. Электромагнитное поле

Векторный потенциал  $\mathbf{A}(x)$  и скалярный потенциал  $\varphi(x) \equiv A^0(x)$  образуют *4-вектор электромагнитного потенциала*

$$A^\mu(x) = (A^0(x), \mathbf{A}(x)) \quad (5.49)$$

со стандартным поведением (см. уравнение (5.29)) при лоренцевских преобразованиях.

Как уже обсуждалось в разд. I.13.2, электромагнитные потенциалы не определяются единственным образом электромагнитными полями. Сохраняя векторный характер  $\mathbf{A}(t, \mathbf{r})$ , можно сделать *калибровочное преобразование*:

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{r}) \Rightarrow \mathbf{A}'(t, \mathbf{r}) = \mathbf{A}(t, \mathbf{r}) + \nabla f(t, \mathbf{r}), \quad (5.50)$$

$$\varphi(t, \mathbf{r}) \Rightarrow \varphi'(t, \mathbf{r}) = \varphi(t, \mathbf{r}) - \frac{\partial f}{\partial t} \quad (5.51)$$

с той же функцией  $f(t, \mathbf{r})$ , как в (5.50). В ковариантных обозначениях уравнения (5.26) калибровочное преобразование (5.50, 5.51) 4-векторного

потенциала (5.49) имеет вид

$$A^\mu(x) \Rightarrow A'^\mu(x) = A^\mu(x) - \partial^\mu f(x). \quad (5.52)$$

Используя два 4-вектора, градиент (5.26) и векторный потенциал (5.49), введем *тензор поля*

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (5.53)$$

По построению, этот тензор антисимметричный,  $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$ , и, следовательно, имеет шесть независимых (недиагональных) компонент. Прямое сравнение с (I.13.6) и (I.13.7) показывает, что  $(j, l = 1, 2, 3)$

$$F^{j0} = -F^{0j} = \mathcal{E}^j \quad (5.54)$$

(электрическое поле) и

$$F^{jk} = -\varepsilon_{jkl} \mathcal{B}^l \quad (5.55)$$

(магнитное поле). Здесь  $\varepsilon_{jkl}$  — 3-мерный антисимметричный тензор. Таким образом, «векторы» электромагнитного поля  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{B}$  в действительности являются компонентами антисимметричного тензора, а не векторами в пространстве Минковского.

Следующее тождество является формальным следствием определения (5.53):

$$\partial^\lambda F^{\mu\nu} + \partial^\mu F^{\nu\lambda} + \partial^\nu F^{\lambda\mu} = 0. \quad (5.56)$$

Легко видеть, что эта комбинация антисимметрична по отношению ко всем трем индексам и, следовательно, (5.56) содержит только  $(4 \cdot 3 \cdot 2)/3! = 4$  независимых уравнения, которые соответствуют *первой паре уравнений Максвелла*, не содержащих зарядов и токов:

$$\operatorname{div} \mathcal{B} = 0, \quad (5.57)$$

$$\operatorname{curl} \mathcal{E} = -\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial t}. \quad (5.58)$$

*Вторая пара* демонстрирует, как поля генерируются зарядами и токами:

$$\operatorname{div} \mathcal{E} = 4\pi \rho_{\text{ch}}, \quad (5.59)$$

$$\operatorname{curl} \mathcal{B} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + 4\pi \mathbf{j}_{\text{ch}}. \quad (5.60)$$

Эти уравнения, выраженные в терминах тензора (5.53) и вектора тока, как в (5.42), явно Лоренц-ковариантны:

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi j_{\text{ch}}^\nu. \quad (5.61)$$

Уравнение (5.56) может быть выражено в другой форме, используя полностью антисимметричный 4-тензор  $\varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho}$ , подобный 3-тензору (I.4.38), но имеющий  $6! = 24$  независимых компонент, равных  $\pm 1$ . Свертка с ним тензора поля (5.53) даёт так называемый *дуальный тензор*

$$\tilde{F}_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho}F^{\lambda\rho}. \quad (5.62)$$

Этот новый тензор также является антисимметричным, но в нём поменялись местами электрические и магнитные поля:

$$F_{0j} = \mathcal{B}_j, \quad F_{jl} = -\varepsilon_{jlk}\mathcal{E}_k. \quad (5.63)$$

Теперь мы можем записать уравнение (5.56) в форме

$$\varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho}\partial^\nu F^{\lambda\rho} = 0, \quad (5.64)$$

где очевидно, что существуют только четыре независимых уравнения.

## 5.10. Принцип минимальности электромагнитной связи

Система уравнений Максвелла достаточна, чтобы определить поля, заданные распределением зарядов и токов во времени и пространстве. Вторая пара (5.59, 5.60) накладывает ограничения на эти распределения. Поскольку  $\text{div curl} \equiv 0$ , эти уравнения совместны, только если плотность заряда и плотность тока удовлетворяют уравнению непрерывности. Это следует немедленно из ковариантной формы (5.44), (5.61): из-за антисимметрии тензора поля,  $\partial_\mu\partial_\nu F^{\mu\nu} \equiv 0$ . Таким образом, электромагнитное поле взаимодействует с *сохраняющимся током*. Характер взаимодействия может быть зафиксирован требованием *калибровочной инвариантности*.

Мы знаем, что калибровочная инвариантность эквивалентна фазовому преобразованию (I.13.26) волновой функции заряженной частицы; в наших единицах

$$\Psi \rightarrow \Psi e^{ief(x)}, \quad (5.65)$$

где  $e$  — электрический заряд частицы, а  $f(x)$  — произвольная регулярная калибровочная функция координат и времени. При этом преобразовании

$$\partial^\mu \Psi \rightarrow \left( (\partial^\mu \Psi) + ie(\partial^\mu f)\Psi \right) e^{ief}. \quad (5.66)$$

Уравнения, содержащие оператор 4-импульса (5.26), будут изменяться в соответствии с

$$\hat{p}^\mu \Psi \rightarrow \left( (\hat{p}^\mu \Psi) - e(\partial^\mu f)\Psi \right) e^{ief}. \quad (5.67)$$

Изменение калибровки (5.65) волновой функции будет компенсироваться, если заряд взаимодействует с *векторным полем*  $A^\mu$  с помощью «удлиненной производной»

$$\partial^\mu \rightarrow D^\mu \equiv \partial^\mu + ieA^\mu. \quad (5.68)$$

Поле, возникающее таким образом, должно иметь свое калибровочное преобразование (5.52) с той же функцией  $f(x)$ , как в (5.65), чтобы уравнения не зависели от калибровки. На этом языке электромагнитное поле является *калибровочным векторным полем*, и мы приходим к рецепту введения взаимодействия заряженной частицы с электромагнитным полем путем подстановки

$$\hat{p}^\mu \rightarrow \hat{p}^\mu - eA^\mu, \quad (5.69)$$

использованной ранее (см. главу I.13) по аналогии с классической теорией. Это так называемая *минимальная связь*. Процедура является более сложной для частиц с нетривиальной внутренней структурой.

УКГ (5.38) для заряженной частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем  $(\varphi, \mathbf{A})$ , принимает вид

$$(\hat{p} - eA)^2 \Psi \equiv \left\{ \left( i \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 - (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 \right\} \Psi = m^2 \Psi. \quad (5.70)$$

Например, для отрицательного пиона заряд  $-e$ , в статическом кулоновском поле ядра с зарядом  $Ze$  мы приходим к аналогу уравнения Шрёдингера для водородоподобного атома:

$$\left\{ \left( i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 - \hat{\mathbf{p}}^2 \right\} \Psi = m^2 \Psi. \quad (5.71)$$

Это уравнение можно применить к пионным (или каонным с отрицательным каоном вместо пиона) атомам для состояний, которые не проникают

вглубь ядер, где ядерные силы, игнорируемые в уравнении (5.71), становятся доминирующими. Даже на атомных орбитах, далеких от ядер, эти силы все еще важны, становясь ответственными за возможный ядерный захват пиона или каона, эффект, который вместе с электромагнитным (обычно рентгеновским) излучением делает все мезоатомные орбиты, включая основное состояние, квазистационарными. Пренебрегая захватом, мы можем определить водородоподобные спектры таких мезоатомов.

### Задача 5.1

Используйте нерелятивистское уравнение Шрёдингера для атома водорода в качестве реперной точки, чтобы найти спектр связанных состояний, предсказываемых уравнением (5.71).

### Решение.

Стационарные состояния с энергией  $E$  являются решениями задачи на собственные значения

$$\left\{ \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 - \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (5.72)$$

Со стандартной процедурой отделения угловых переменных уравнение может быть переписано для радиальной функции  $R_\ell(r) = u_\ell(r)/r$   $\ell$ -той парциальной волны как

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1) - Z^2e^4}{r^2} - \frac{2EZe^2}{r} \right\} u_\ell = (E^2 - m^2)u_\ell. \quad (5.73)$$

Это согласуется с уравнением (I.18.2) для атома водорода с очевидным соответствием:

$$\ell(\ell+1) \Rightarrow \ell(\ell+1) - Z^2e^4, \quad k^2 \Rightarrow E^2 - m^2, \quad e^2 \Rightarrow e^2 \frac{E}{m}. \quad (5.74)$$

В уравнении Шрёдингера спектр связанных состояний (I.18.14) описывался уравнением

$$E_{n\ell} = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2}, \quad (5.75)$$

где главное квантовое число (I.18.13),  $n = N + \ell + l$ , отличается от  $\ell$  на целое число. Теперь вместо  $\ell$  мы должны использовать  $\ell'$ , как это следует

из первого равенства (5.74),

$$\ell' = \sqrt{(\ell + 1/2)^2 - Z^2 e^4} - 1/2 \equiv \ell - \Delta_\ell, \quad (5.76)$$

где  $\Delta_\ell$ , определённое этим уравнением, есть требуемый сдвиг  $\ell$  и, следовательно, также главного квантового числа. Используя подстановки (5.74) и (5.76), получим вместо (5.75)

$$\frac{E_{n\ell}^2 - m^2}{2m} = -\frac{mZ^2 e^4}{2(n - \Delta_\ell)^2} \frac{E_{n\ell}^2}{m^2}. \quad (5.77)$$

Это новое уравнение для  $E_{n\ell}$  с результатом

$$E_{n\ell} = \frac{m}{\sqrt{1 + [Z^2 e^4 / (n - \Delta_\ell)^2]}}. \quad (5.78)$$

«Случайное» кулоновское вырождение (см. разд. П.3.2) исчезает и уровни внутри главной оболочки расщепляются в соответствии с их угловым моментом  $\ell$ . Нерелятивистский предел соответствует разложению в ряды по степеням  $Z^2 e^4 = (Z\alpha)^2$ ,

$$\Delta_\ell \approx \frac{(Z\alpha)^2}{2\ell + 1}, \quad E \approx m \left\{ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \left[ \frac{3}{8n} - \frac{1}{2\ell + 1} \right] \right\}. \quad (5.79)$$

Эта теория перестает работать при  $Z\alpha > 1/2$ , когда, в соответствие с (5.76),  $\Delta_0$  становится комплексной. В таких сильных полях одночастичная аппроксимация не работает, размер орбиты становится порядка комптоновской длины волны, что нарушает релятивистские соотношения неопределённостей (5.3).

Релятивистские поправки, предсказанные УКГ, не согласуются с экспериментальными данными по тонкой структуре водородоподобного спектра для ионов с одним электроном. Это показывает, что УКГ для скалярной функции  $\Psi$  не описывает квантовое поведение релятивистских электронов. Однокомпонентная функция  $\Psi$  соответствует частице со спином  $s = 0$ . Для частиц с бóльшим спином существует внутренняя *многокомпонентная* динамика в дополнение к общерелятивистскому требованию, чтобы каждая компонента удовлетворяла УКГ.

## 5.11. Фотопоглощение при высоких энергиях

Здесь мы сделаем поверхностный обзор некоторых процессов при энергиях выше, чем те, при которых применима нерелятивистская квантовая

механика. Чтобы облегчить сравнение порядков величин, мы вернемся к обычным единицам.

Сечение атомного фотоэлектрического эффекта падает при  $\hbar\omega \gg mc^2$ , как обсуждалось в разд. II.14.8. Фотоэффект — это главный канал поглощения мягкого гамма-излучения до энергий  $\hbar\omega \sim (10 - 100)$  КэВ. Наши результаты хорошо работают до  $\hbar\omega \approx mc^2/2$ , и фотопоглощение на  $K$ -оболочке даёт главный вклад в полный эффект. Когда мы доходим до  $\hbar\omega$  порядка нескольких МэВ, главный механизм поглощения гамма-лучей это эффект Комптона (гл. I.1), рассеяние света на электронах, которые могут рассматриваться как свободные частицы при таких больших значениях  $\hbar\omega$ . Используя результаты вычислений разд. II.14.8, мы можем проследить переход рассеяния света на связанных электронах в комптоновское рассеяние, где электрон может рассматриваться как свободная частица.

При возрастании  $\omega$  длина волны фотона становится меньше размеров атома. В матричных элементах (II.15.61) и (II.15.62) функция  $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}$  осциллирует на размерах атома, и амплитуда рассеяния с переходами электрона в дискретном спектре быстро убывает. Это то же самое, что и уменьшение атомного форм-фактора с увеличением передачи импульса, см. разд. II.12.3. Тогда, по аналогии с рассеянием заряженных частиц, роль процессов, связанных с переходом атомного электрона в континуум, возрастает. Если конечный импульс электрона близок к  $\mathbf{p} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ , осциллирующая экспонента  $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}$  компенсируется плоской волной электрона. В этом случае для заданного угла рассеяния  $\theta$  между  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  частота  $\omega'$  рассеянного фотона определяется законами сохранения импульса и энергии, которые те же самые, что и для рассеяния свободного электрона, — это тот же эффект Комптона. В результате появляется узкая линия с частотой  $\omega'$ , определённой выражением (I.1.7),

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + (\hbar\omega/mc^2)(1 - \cos\theta)}. \quad (5.80)$$

Ширина линии Комптона (5.80) зависит от неопределенности  $\Delta p$  импульса электрона в атоме. В пределе  $\hbar\omega/mc^2 \ll 1$  комптоновское рассеяние переходит в томсоновское рассеяние свободных электронов с сечением (II.15.86).

При высоких энергиях  $\hbar\omega \gg mc^2$  для не слишком малых углов рассеяния конечная длина волны  $\lambda' = 2\pi\lambda_C(1 - \cos\theta)$  не зависит от начальной частоты  $\omega$ , поскольку определяется комптоновской длиной волны  $\lambda_C$ . Точное вычисление комптоновского рассеяния в квантовой электродинамике

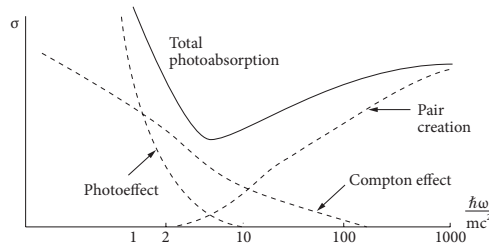


Рис. 5.1. Роль различных механизмов фотопоглощения

даётся формулой Клейна—Нишины—Тамма, 1929-1930 [30],

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 \frac{\omega'^2}{4\omega^2} \left( \frac{\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{\omega} - 2 + 4(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*)^2 \right), \quad (5.81)$$

где  $\mathbf{e}$  и  $\mathbf{e}'$  — векторы поляризации для исходного и конечного фотонов соответственно;  $r_0$  — классический радиус электрона (I.1.40) и  $\omega'$  определяется через угол рассеяния (5.80). Для  $\omega' = \omega$  мы снова приходим к томсоновскому рассеянию (II.15.83).

### Задача 5.2

Вычислить полное сечение рассеяния неполяризованных фотонов при  $\nu = \hbar\omega/mc^2 \gg 1$ .

**Решение.**

$$\sigma = \pi r_0^2 \frac{1}{\nu} \left( \ln(2\nu) + \frac{1}{2} \right). \quad (5.82)$$

Для атома результат должен быть умножен на число электронов  $Z$ . Сечение падает с ростом частоты  $\omega$ . Это означает, что проникающая способность гамма-лучей или жесткого рентгена возрастает.

Новый процесс, *рождение пары*  $e^+e^-$ , становится возможным для  $\nu > 2$ , т. е.  $\hbar\omega > 2m_e c^2 \approx 1$  МэВ. Это возможно в присутствии ядер, которые получают недостающий импульс, чтобы удовлетворить законам сохранения. В то же время энергия отдачи ядра мала, поскольку велика его масса. Сечение рождения пары [30] возрастает с частотой  $\propto Z^2 \ln \omega$  и перестаёт зависеть от  $\omega$  для очень больших частот. При  $\nu > 10$  рождение пары является доминирующим механизмом фотопоглощения. Рис. 5.1 грубо иллюстрирует относительную роль различных механизмов фотопоглощения тяжелыми атомами в зависимости от энергии фотона.

## 5.12. Ядерный фотоэффект

Начиная с энергии фотонов в несколько МэВ становится возможным *ядерный фотоэффект*. Фотон поглощается ядром и выбивает один или несколько нуклонов (энергия связи нуклона в ядре обычно 7-8 МэВ, хотя может быть существенно меньше, до сотен КэВ, в тяжёлых ядрах). Вследствие сильного взаимодействия между нуклонами в ядре существуют относительно долгоживущие состояния с энергией возбуждения выше порога вылета нуклона. Эти квазистационарные состояния имеют чрезвычайно сложные волновые функции в терминах одночастичных переменных. Качественная картина такова: можно сказать, что энергия возбуждения распределена по многим степеням свободы, и средняя энергия на нуклон недостаточна, чтобы нуклон вылетел, — картина *составного ядра*, один из лучших примеров *квантового хаоса в системе многих тел*, глава 18.

Эта картина (*Н. Бор, 1936*) может быть интерпретирована в духе термодинамики как «горячая капля» ядерной материи. Ее время жизни превышает время Вайскопфа (4.82) возврата волнового пакета (аналог времени возврата Пуанкаре в классической механике). Существует вероятность редких флуктуаций с энергией возбуждения, сконцентрированной на отдельном нуклоне, который при этом может покинуть ядро. Однако этот процесс отличен от собственно фотоэффекта. Вылетевший нуклон *теряет память* о канале возбуждения, который создал составное ядро, и излучение напоминает *испарение* из жидкой капли. Угловое распределение вылетающих частиц, в противоположность к (II.14.74), близко к изотропному, а энергетический спектр близок к максвелловскому. Вместо испарения ядра могут также излучаться вторичные гамма-лучи, зависящие от доступных дискретных состояний при более низкой энергии возбуждения ядра. Конечно, составное ядро может быть создано не только гамма-лучами, но также и в различных ядерных реакциях.

Во всех ядрах наблюдается широкий (3–4 МэВ) максимум фотопоглощения при энергиях, в среднем обратно пропорциональных радиусу ядра (рис. 5.2). Этот максимум возбуждается электрическим дипольным переходом и обычно называется *гигантским дипольным резонансом*. Похожие, но менее выраженные резонансы существуют для других низких мультипольностей. Этот резонанс может грубо интерпретироваться как коллективное дипольное колебание протонов по отношению к нейтронам. Сечение фотопоглощения, проинтегрированное по резонансу  $\int dE_\gamma \sigma$ , почти насыщает дипольное правило сумм (см. задачи II.14.3, II.14.4). Большая ширина показывает, что состояние гигантского резонанса имеет короткое время жизни

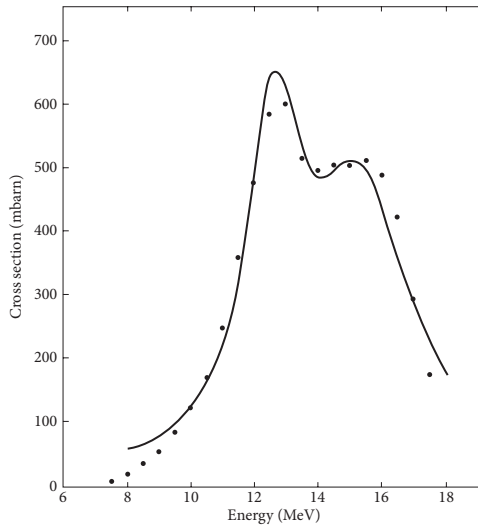


Рис. 5.2. Гигантский резонанс в ядерном фотопоглощении; два пика соответствуют колебаниям вдоль оси растянутой деформации (меньшие частоты) и вдоль одной из двух более коротких осей (большие частоты и двойная ширина) [31]

(в действительности всего несколько периодов колебаний). Если разрешить тонкую структуру спектра в области резонанса, то можно увидеть огромное число узких квазистационарных состояний с промежутками в  $\sim 1-10$  эВ, которые упоминались выше как хаотические компаунд-состояния (состояния составного ядра), распадающиеся в процессе медленного испарения. Будучи однажды возбуждённой, когерентная суперпозиция компаунд-состояний формирует гигантский резонанс (см. главу 15) как типичное коллективное возбуждение типа частица-дырка (см. также разд. I.10.8), которое рассыпается позднее на некогерентные компоненты с разными энергиями. Это порождает наблюдаемую ширину гигантского резонанса; прямой вылет нуклонов дает лишь малую долю полной ширины. В экзотических ядрах с большим преобладанием нейтронов наблюдается нижележащая ветвь дипольного резонанса (так называемый *пигми-резонанс*), предположительно индуцируемая колебаниями нейтронной оболочки относительно ядерного кора.

При энергиях  $\hbar\omega$  порядка ГэВ, кроме атомных и ядерных процессов (включая комптоновское рассеяние на нуклонах), становится возможным фоторождение других частиц. При достаточно высокой энергии гамма-лучи

могут генерировать электрон-позитронный *ливень*: пары частиц, рождённые первичным фотоном, тормозятся в поле ядра и излучают новые фотоны, которые, в свою очередь, порождают новые пары и т. д.

### 5.13. Оценки процессов в КЭД

Точные вычисления вероятностей электродинамических процессов с релятивистскими частицами возможны только при использовании КЭД-формализма, который находится за рамками нашего курса. Ниже мы попытаемся дать некоторые качественные оценки, основанные на нашем прежнем опыте. Здесь мы используем обычные единицы.

Интенсивность дипольного излучения электроном, движущимся с ускорением  $\dot{v}$ , можно оценить классической формулой

$$I \sim \frac{\dot{d}^2}{c^3} \sim \frac{e^2}{c^3} \dot{v}^2. \quad (5.83)$$

Для осциллятора частоты  $\omega$  скорость эмиссии фотонов будет

$$\dot{v} \sim \frac{I}{\hbar\omega} \sim \frac{e^2}{\hbar\omega c^3} \omega^2 v^2 \sim \alpha\omega \left(\frac{v}{c}\right)^2. \quad (5.84)$$

В среднем один фотон излучается за  $(1/\alpha)(c/v)^2$  периодов ( $T \sim 1/\omega$ ) колебаний. Следовательно, время жизни возбужденного осциллятора  $\tau \sim (c/v)^2(1/\alpha\omega)$ , или для атома, где  $(v/c) \sim Z\alpha$ ,  $\hbar\omega \sim mc^2(Z\alpha)^2$ ,  $m = m_e$ ,

$$\tau \sim \frac{1}{\alpha\omega} \frac{1}{(Z\alpha)^2} \sim \frac{\hbar}{mc^2} \frac{1}{\alpha(Z\alpha)^4} \sim \frac{10^{-9} \text{ с}}{Z^4}. \quad (5.85)$$

Отношение времени жизни к периоду колебаний  $\tau/T \sim \omega\tau \sim \alpha^{-1}(Z\alpha)^{-2} \gg 1$  определяет малость ширины уровня  $\Gamma = \hbar\gamma$  в сравнении с его энергией:  $E/\Gamma \sim \hbar\omega/\hbar\gamma \sim \omega\tau \gg 1$  (высокая *добротность* атомного осциллятора). Предельная длина цуга световых волн (*длина когерентности*) оценивается как

$$c\tau \sim \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha(Z\alpha)^4} \sim \frac{10 \text{ см}}{Z^4}. \quad (5.86)$$

Чтобы оценить процессы излучения для быстро движущейся частицы, мы можем снова использовать уравнение (5.83). Если скорость электрона изменяется на  $\Delta v$  в течение времени  $\Delta t$ , интенсивность излучения может

быть оценена как

$$I\Delta t \sim \frac{e^2}{c^3} \left( \frac{\Delta v}{\Delta t} \right)^2 \Delta t \sim \frac{e^2}{c^3} \frac{(\Delta v)^2}{\Delta t}. \quad (5.87)$$

Взяв  $\Delta t$  в качестве характерного времени движения электрона, мы ожидаем, что спектр излучения содержит главным образом частоты  $\omega \sim 1/\Delta t$  (мы здесь не рассматриваем ультрарелятивистское движение с  $E \gg mc^2$ ). Типичная энергия испущенного фотона  $E_\gamma \sim \hbar\omega \sim \hbar/\Delta t$ , а полная вероятность испускания

$$w_1 \sim \frac{I\Delta t}{\hbar\omega} \sim \frac{e^2}{c^3} \frac{(\Delta v)^2}{\Delta t} \frac{\Delta t}{\hbar} \sim \frac{e^2}{\hbar c^3} (\Delta v)^2 \sim \alpha \left( \frac{\Delta v}{c} \right)^2. \quad (5.88)$$

Последовательные акты испускания почти независимы, поэтому вероятность излучения двух фотонов по порядку величины есть квадрат вероятности излучения одного фотона:

$$w_2 \sim w_1^2 \sim \left[ \alpha \left( \frac{\Delta v}{c} \right)^2 \right]^2 \ll w_1. \quad (5.89)$$

Даже для релятивистских частиц, когда  $\Delta v/c \sim 1$ , излучение дополнительного фотона подавляется малым множителем  $\sim \alpha$ .

Подобным же образом можно оценить вероятность аннигиляции пары ( $e^+, e^-$ ). Аннигиляция пары (при свободном движении или в состоянии *позитрония*) в один реальный фотон запрещена законами сохранения. Однако этот процесс возможен как виртуальный. Например, связь с полем излучения (часть радиационных поправок) дает возможность позитронию на короткое время стать фотоном, а это приводит к наблюдаемому сдвигу энергетических уровней позитрония. Мы можем оценить этот сдвиг.

Электрон не может быть локализован точнее, чем на размере его комптоновской длины волны  $\lambda_C$ , уравнение (1.5.85). Для аннигиляции позитрон и электрон должны находиться внутри этого пространственного интервала. Если так, то вероятность перехода в однофотонное состояние может быть оценена как  $w_1$ , уравнение (5.88), с  $\Delta v \sim c$ , т. е.  $w_1 \sim \alpha$ . Это означает, что для времени, проведенного партнерами на этом расстоянии  $\leq \lambda_C$ , доля времени  $\alpha$  может быть ассоциирована с виртуальным состоянием фотона. В основном состоянии позитрония партнеры находятся в среднем на относительном расстоянии порядка боровского радиуса,  $a \sim \lambda_C/\alpha$ . Они приближаются друг к другу на расстояние  $\sim \lambda_C$  на долю времени, рав-

ную отношению соответствующих объемов,  $(\lambda_C/a)^3 \sim \alpha^3$ . Таким образом, полная доля времени, которая может быть идентифицирована с однофотонным состоянием, есть  $\alpha \cdot \alpha^3 = \alpha^4$ . Эти соображения справедливы лишь для  $s$ -состояния относительного движения, иначе вероятность тесного сближения становится слишком малой.  $s$ -Состояние позитрония обладает сдвигом уровня, равным произведению этой вероятности  $\alpha^4$  на изменение энергии  $\sim mc^2$  при переходе в состояние фотона:

$$\delta E \sim a^4 mc^2. \quad (5.90)$$

Отметим, что этот сдвиг того же порядка, что и тонкое или сверхтонкое расщепление в позитронии (гл. II.9). В отличие от энергии, угловой момент сохраняется в матричном элементе перехода. Поскольку спин фотона равен 1, энергетический сдвиг (5.90) существует только для *ортопозитрония* (триплет,  $J = S = 1$ ) и отсутствует для *парапозитрония* (синглет,  $J = S = 0$ ).

Для *реального процесса двухфотонной аннигиляции* электрон и позитрон должны приблизиться на относительное расстояние  $\sim \lambda_C$  и испустить два фотона с энергией  $\hbar\omega \sim mc^2$ . В сравнении с однофотонным процессом с вероятностью  $\sim \alpha^4$  необходимо испустить еще один фотон в течение времени  $\Delta t$  существования однофотонного состояния. Соотношение неопределенности  $\Delta t \sim \hbar/mc^2$  определяет скорость испускания второго фотона  $\alpha/\Delta t \sim \alpha mc^2/\hbar$  и полную скорость двухфотонной аннигиляции  $\dot{w} \sim \alpha^4 \cdot \alpha mc^2/\hbar \sim \alpha^5 mc^2/\hbar$ . Отсюда мы можем получить время жизни парапозитрония

$$\tau_{\text{пара}} \sim \frac{\hbar}{mc^2} \frac{1}{\alpha^5} \sim 10^{-9} \text{ с}. \quad (5.91)$$

Сравнение (5.91) с (5.86) показывает, что для *парапозитрония* парциальные времена жизни возбужденных состояний по отношению к излучению и основного состояния по отношению к двухфотонной аннигиляции имеют одинаковый порядок. Как видно из (5.91), ширина основного состояния парапозитрония  $\Gamma_{\text{пара}} \sim \hbar/\tau_{\text{пара}} \sim mc^2 \alpha^5$ , что в  $\alpha$  раз меньше, чем интервалы тонкой структуры (5.90). При аннигиляции *ортопозитрония* допустимы только три фотона (два фотона не имеют состояний с угловым моментом, равным единице, как спин ортопозитрония). Соответствующая вероятность содержит дополнительный множитель  $\alpha$ , поэтому время жизни  $\tau_{\text{орто}}$  больше на два порядка,  $\sim 10^{-7}$  с.

**Задача 5.3**

Рассмотреть эффект Зеемана в основном состоянии позитрония, предполагая величину магнитного поля такой, что этот эффект сравним с расщеплением между пара- и ортопозитронием; соответствующий гамильтониан может быть записан как

$$\hat{H}' = A(\hat{s}_+ \cdot \hat{s}_-) - \mu_B \mathcal{B}(\hat{s}_{+z} - \hat{s}_{-z}). \quad (5.92)$$

Здесь  $\mathbf{s}_{\pm}$  относится к спину электрона и позитрона.

**Решение.**

Нужно диагонализировать гамильтониан (5.92) в  $4 \times 4$  пространстве (синглет парапозитрония и триплет ортопозитрония). Полная проекция спина  $S_z$  сохраняется. Триплетные состояния,  $S_z = \pm 1$ , аналогично  $2p$ - и  $2s$ - уровням водорода в случае линейного электрического поля (задача II.9.5) являются правильными линейными комбинациями в присутствии магнитного поля. Состояния синглета и триплета с  $S_z = 0$  смешаны, и секулярное уравнение даёт

$$\delta E(S_z = 0) = -\frac{A}{4} \left[ 1 \pm \sqrt{4 + \left( \frac{4\mu_B \mathcal{B}}{A} \right)^2} \right]. \quad (5.93)$$

Состояние с более высокой энергией при  $\mathcal{B} = 0$  отвечает ортопозитронию; при  $\mathcal{B} \neq 0$  оно является суперпозицией состояний синглета и триплета.

**Задача 5.4**

Из-за примеси синглета время жизни верхнего состояния (задача 5.3) уменьшается в присутствии магнитного поля (*гашение ортопозитрония*). Оценить поле  $\mathcal{B}$ , которое сокращает время жизни  $\tau_{\text{орто}}$  в 10 раз.

Процессы с виртуальными парами вносят вклад также в рассеяние света зарядом (гл. II.15). В дополнение к поглощению фотона с последующим испусканием и процессу в обратной последовательности (рис. II.15.4), которые приводят к сечению  $\sim r_0^2 \sim 10^{-25} \text{ см}^2$ , падающий фотон  $\gamma$  может рожать виртуальную  $e^+ - e^-$ -пару. Позитрон пары аннигилирует с исходным электроном в новый квант  $\gamma'$ . Чтобы оценить вероятность аннигиляции, нам понадобится произведение вероятности в единицу времени  $\dot{w}^{(1)}$  для фотона быть на нужном расстоянии  $\sim \lambda_C$  от электрона, вероятности  $w^{(2)}$  родить пару, и вероятности  $w^{(3)}$  аннигиляции с испусканием фотона  $\gamma'$ . Как и ранее,  $w^{(2)} \sim w^{(3)} \sim \alpha$ . Скорость  $\dot{w}^{(1)}$  определяется отношением объема трубки (с сечением  $\lambda_C^2$  и длиной, равной скорости фотона  $c$ ) к полному объему  $V$ ,  $\dot{w}^{(1)} \sim (\hbar/mc)^2 (c/V)$ . Тогда сечение определяется этой скоростью,

деленной на падающий поток  $c/V$ :

$$\sigma \sim \frac{\dot{w}^{(1)}w^{(2)}w^{(3)}}{c/V} \sim \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \frac{c}{V} \cdot \alpha \cdot \alpha \cdot \frac{1}{c/V} \sim \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \alpha^2 \sim r_0^2, \quad (5.94)$$

будучи того же порядка, что и обычное томсоновское сечение (II.15.83) рассеяния свободными электронами. При точных вычислениях оба типа рассеяния должны вычисляться сложением их амплитуд, а не вероятностей. Следует также учитывать виртуальные пары при рассеянии заряженных частиц, в особенности при высоких энергиях и для больших углов рассеяния (малый прицельный параметр). Хотя рождаются могут пары любых заряженных частиц, для фотонов с энергией  $\hbar\omega$  только образование виртуальных пар частиц с массами  $M$ , не превышающими существенно  $\hbar\omega/c^2$ , даёт заметный вклад.

**Дополнительная литература:** [7], [30], [32], [33], [34].

Знаменитый математик Марк Кац однажды поделил гениев на два класса. Он сказал: существуют обычные гении, чьим достижениям могут подражать разумные люди, проделав исключительно тяжелую работу и поймав удачу. Затем приходят волшебники, изобретения которых так поразительны, так противоположны интуиции их коллег, что трудно представить, как человек может вообразить их. Дирак был волшебником.

*Г. Сегрэ. «Фауст в Копенгагене»*

## Глава 6

### Уравнение Дирака: формализм

#### 6.1. Введение уравнения Дирака

Здесь мы введем уравнение, которое рассматривается многими физиками как наиболее важное и элегантное уравнение всей современной физики. *Уравнение Дирака* описывает частицы со спином  $1/2$ , которые являются главными компонентами материи, — электроны, нейтрино, кварки и нуклоны. Внешнее электромагнитное поле также может быть добавлено для электрона с помощью принципа минимальности (разд. 5.10), хотя ситуация для нуклона является более сложной из-за сильных взаимодействий.

Обращаясь к релятивистски ковариантному описанию частицы со спином  $1/2$ , мы должны помнить, что волновая функция должна быть *многокомпонентной*: нам нужно описать два возможных состояния спина и состояния с отрицательной энергией, которые позже будут интерпретированы в терминах античастиц — позитронов, антинейтрино, антикварков и антинуклонов. Таким образом, мы ожидаем, что *минимальное* число компонент волновой функции будет равно четырем. Такая функция называется *биспинором*, и мы можем представить её как столбец  $\Psi$  с четырьмя компонентами  $\Psi_{1,2,3,4}$ . Все операторы, действующие на такие функции, должны быть *матрицами*  $4 \times 4$ . Чтобы иметь стандартную форму гамильтониана

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (6.1)$$

и, следовательно, развить обычную вероятностную интерпретацию, совместимую с релятивизмом, оператор импульса  $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$  должен входить в

гамильтониан  $\hat{H}$  линейно, поскольку уравнение (6.1) линейно по отношению к производным по времени. Для свободного движения координаты и время не могут входить в уравнение явно, если мы предполагаем однородность пространства и времени. Последнее связано, как в классической механике и нерелятивистской квантовой механике, с сохранением энергии-импульса. Поэтому компоненты импульса  $\hat{p}_i$  могут появляться только с постоянными коэффициентами, которые, однако, должны быть матрицами в пространстве биспиноров. Общая линейная форма в компонентах импульса ( $\hbar = c = 1$ , как было принято ранее)

$$\hat{H} = \alpha_1 \hat{p}_1 + \alpha_2 \hat{p}_2 + \alpha_3 \hat{p}_3 + \beta m \equiv (\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + \beta m. \quad (6.2)$$

Здесь  $\alpha_i$  и  $\beta$  — безразмерные постоянные эрмитовы матрицы  $4 \times 4$ , и  $m$  — константа размерности энергии, которая, естественно, должна быть идентифицирована с массой частицы, поскольку для покоящейся частицы должно быть  $E = m$ .

Вследствие принципа суперпозиции каждая компонента биспинора  $\psi$  представляет возможное состояние свободной частицы с релятивистским законом дисперсии (5.13). Так будет в случае, если

$$\hat{H}^2 = m^2 + \hat{\mathbf{p}}^2. \quad (6.3)$$

С другой стороны, квадрат оператора (6.2) должен быть вычислен с учётом матричной природы коэффициентов, принимая во внимание, что матрицы коммутируют с пространственно-временными производными, но, вообще говоря, не коммутируют друг с другом. Сохраняя правильный порядок матричных множителей, получим

$$\hat{H}^2 = \beta^2 m^2 + m \hat{p}_j [\beta, \alpha_j]_+ + \hat{p}_i \hat{p}_j \alpha_i \alpha_j, \quad (6.4)$$

где присутствует антикоммутатор операторов  $\beta$  и  $\alpha_j$ . Последний член в (6.4) содержит на самом деле только симметричную комбинацию  $\alpha$ -матриц, то есть снова антикоммутатор. Так как уравнения (6.3) и (6.4) должны совпадать, мы получаем матричные условия

$$\beta^2 = 1; \quad [\beta, \alpha_j]_+ = 0; \quad (6.5)$$

$$\alpha_j^2 = 1 \quad (j = 1, 2, 3); \quad [\alpha_i, \alpha_j]_+ = 0, \quad i \neq j. \quad (6.6)$$

Уравнения (6.5) и (6.6), вместе с эрмитовостью,  $\alpha_j^\dagger = \alpha_j$ ,  $\beta^\dagger = \beta$ , являются единственными условиями, которые определяют алгебру матриц

Дирака  $\alpha_j$  и  $\beta$ . Этим условиям можно удовлетворить различными наборами матриц, которые взаимосвязаны унитарными преобразованиями. Все такие наборы физически эквивалентны; переход к другому набору означает просто другую линейную комбинацию четырех уравнений (6.1). *Стандартное представление*, где матрицы выбраны как

$$\beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

зачастую удобно. Здесь и ниже мы используем для краткости двумерную форму четырёхмерных матриц, где блоки  $2 \times 2$  включают нулевую матрицу, единичную матрицу  $\hat{1}$  и матрицы Паули  $\sigma_i$ . Мы использовали такую форму в уравнении (5.30), где, однако, размерность четыре произошла из пространственно-временной размерности, а не из биспинорной структуры.

Мы пришли к уравнению Дирака для свободной частицы с массой  $m$ :

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \{ \beta m + (\alpha \cdot \hat{\mathbf{p}}) \} \Psi. \quad (6.8)$$

По построению уравнения (6.3), каждая компонента биспинора удовлетворяет УКГ. На самом деле общие условия не определяют размерности матриц и волновых функций. Однако четыре — это *минимально* возможная размерность; функции с большим числом компонент могут описывать частицы с большими спинами.

## 6.2. Ковариантная форма и алгебра

Матрицы  $\beta$  и  $\alpha$  подходят для рассмотрения в некоторой фиксированной системе отсчёта. Чтобы получить явно *ковариантное* выражение, полезен другой набор матриц —  $\gamma_\mu = (\gamma_0, \boldsymbol{\gamma})$ :

$$\gamma_0 = \beta, \quad \boldsymbol{\gamma} = \beta \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ -\sigma & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

Их коммутационные соотношения можно легко вывести из (6.5) и (6.6):

$$[\gamma_\mu, \gamma_\nu]_+ = 2g_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3. \quad (6.10)$$

Здесь мы используем стандартный метрический тензор  $g_{\mu\nu}$ , уравнение (5.20). В соответствии с (6.10),

$$\gamma_0^2 = 1, \quad \gamma_{1,2,3}^2 = -1. \quad (6.11)$$

Для того чтобы выписать уравнение Дирака в новой форме, умножим (6.8) на матрицу  $\gamma_0 = \beta$  и перейдём к ( $\hat{E} = i\partial/\partial t \equiv i\partial^0$ ):

$$\{\gamma_0 \hat{E} - (\vec{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - m\} \Psi = 0 \quad (6.12)$$

или в ковариантной форме

$$(\gamma_\mu \hat{p}^\mu - m) \Psi = 0. \quad (6.13)$$

Иногда также удобно ввести «скалярное произведение»  $\underline{V}$  обычного вектора  $V^\mu = (V^0, \mathbf{V})$  на матричный  $\gamma_\mu$ :

$$\underline{V} \equiv \gamma_\mu V^\mu = \gamma_0 V^0 - (\vec{\gamma} \cdot \mathbf{V}). \quad (6.14)$$

Тогда уравнение Дирака принимает изящную форму

$$(\underline{\hat{p}} - m) \Psi = 0. \quad (6.15)$$

Конечно, ковариантные свойства ещё должны быть явно продемонстрированы рассмотрением фактического преобразования Лоренца пространственно-временных координат и преобразования биспинора, порождённого переходом к другой системе отсчёта.

Наряду с четырьмя матрицами  $\gamma_\mu$ , полезна также дополнительная матрица

$$\gamma_5 = i\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_0. \quad (6.16)$$

В стандартном представлении (6.7)

$$\gamma_5 = - \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

Заметим, что в этом представлении матрицы  $\gamma_{0,1,3,5}$  вещественны, в то время как  $\gamma_2$  мнимая, аналогично стандартному представлению двумерных матриц Паули  $\sigma$ . Матрицы  $\gamma_{0,2,5}$  симметричны, а  $\gamma_{1,3}$  антисимметричны. В результате матрицы  $\gamma_0$  и  $\gamma_5$  эрмитовы, в то время как пространственные матрицы  $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_{1,2,3})$  антиэрмитовы. Многие алгебраические свойства

$\gamma$ -матриц инвариантны по отношению к изменению представления, будучи полностью определяемы соотношениями коммутации (6.10).

### Задача 6.1

Доказать алгебраические свойства

$$\gamma_5^2 = 1; \quad [\gamma_5, \gamma_\mu]_+ = 0, \quad \mu = 0, 1, 2, 3. \quad (6.18)$$

### Задача 6.2

Показать, что все  $\gamma$ -матрицы имеют нулевой след.

#### Решение.

Вследствие циклической инвариантности следа и свойств (6.18)

$$\text{tr}(\gamma_\mu) = \text{tr}(\gamma_\mu \gamma_5^2) = \text{tr}(\gamma_5 \gamma_\mu \gamma_5) = -\text{tr}(\gamma_\mu \gamma_5^2) = -\text{tr}(\gamma_\mu) = 0. \quad (6.19)$$

Таким же образом можно показать, что  $\text{tr}(\gamma_5) = 0$  и след любого произведения *нечётного* числа  $\gamma$ -матриц исчезает. Для *чётного* числа матриц мы получим в силу антикоммутаторов (6.10):

$$\text{tr}(\gamma_\mu \gamma_\nu) = \frac{1}{2} \text{tr}([\gamma_\mu, \gamma_\nu]_+) = \frac{1}{2} \text{tr}(2g_{\mu\nu}) = 4g_{\mu\nu}. \quad (6.20)$$

Процедура естественно обобщается на большее (чётное) число множителей внутри следа. Используя соотношения коммутации, можно передвигать левый множитель вправо, а в конце инвариантность относительно циклической перестановки позволяет привести след к исходной форме. Накопленные по пути антикоммутаторы дают новые следы с числом сомножителей на два меньше. Например, случай четырех матриц сводится к предыдущему случаю (6.20):

$$\text{tr}(\gamma_\kappa \gamma_\lambda \gamma_\mu \gamma_\nu) = 4(g_{\kappa\lambda} g_{\mu\nu} - g_{\kappa\mu} g_{\lambda\nu} + g_{\kappa\nu} g_{\lambda\mu}). \quad (6.21)$$

Другой полезный пример:

$$\text{tr}(\gamma_5 \gamma_\kappa \gamma_\lambda \gamma_\mu \gamma_\nu) = -4i \varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu}, \quad (6.22)$$

где, как в уравнении (5.62), мы вводим полностью антисимметричный тензор ранга 4  $\varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu}$ . Результат (6.22) можно легко понять, так как каждый

матричный множитель внутри  $\gamma_5$  матрицы должен найти своего партнера среди оставшихся матриц, а это возможно, только если все из них различны; вдобавок результат антисимметричен по отношению к этим матрицам, поскольку они антикоммутируют.

### 6.3. Ток

В противоположность УКГ для уравнения Дирака возможно построить сохраняющуюся положительно определенную плотность прямым копированием результатов уравнения Шрёдингера. Определим эту плотность

$$\rho = \Psi^\dagger \Psi \quad (6.23)$$

как скалярное произведение (числовая функция координат, а не матрица) эрмитово сопряжённого биспинора  $\Psi^\dagger$ , который является строкой

$$\Psi^\dagger = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*), \quad (6.24)$$

построенной из комплексно сопряжённых компонент первоначального биспинора-столбца  $\Psi$ .

Из уравнения Дирака (6.8) приходим к уравнению для сопряженного биспинора

$$-i \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} = \Psi^\dagger \beta m + (\hat{\mathbf{p}} \Psi)^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha}, \quad (6.25)$$

где  $(\hat{\mathbf{p}} \Psi)^\dagger = i \nabla \Psi^\dagger$ . Комбинируя (6.8) и (6.25), найдём уравнение движения для плотности (6.23):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\Psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \Psi). \quad (6.26)$$

Таким образом, получим *уравнение непрерывности*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0 \quad (6.27)$$

с сохраняющейся плотностью тока

$$\mathbf{j} = \Psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \Psi. \quad (6.28)$$

Существование сохраняющегося тока позволяет сделать прямое обобщение полного формализма Гильбертова пространства с плотностью (6.23), понимаемой вероятностным образом, и амплитудами, определяемыми как

скалярные произведения

$$\langle a|b\rangle_t = \int d^3r \Psi_a^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_b(\mathbf{r}, t). \quad (6.29)$$

Мы можем (формально на этой стадии) представить плотность  $\rho$  и плотность тока  $\mathbf{j}$  как временную и пространственные компоненты *4-тока*  $j^\mu = (\rho, \mathbf{j})$ , если определим вместо эрмитово сопряжённого биспинора  $\Psi^\dagger$  *дираковски сопряжённый* биспинор

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \beta = \Psi^\dagger \gamma_0. \quad (6.30)$$

Тогда 4-ток равен

$$j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi. \quad (6.31)$$

## 6.4. Зарядовое сопряжение

Теперь мы покажем, что уравнение Дирака содержит решения, которые можно сгруппировать парами и интерпретировать как относящиеся к частицам и античастицам. Предполагаемая симметрия между частицами и античастицами должна проявиться в том, что *свободное движение* двух типов объектов тождественно. Однако они могут распознаваться по их поведению во внешнем поле, которое чувствительно к *заряду*, если наша интерпретация решений с отрицательной энергией как частиц с положительной энергией, но противоположным зарядом имеет смысл.

Принцип минимальности включения электромагнитного поля связан с калибровочной инвариантностью, как мы помним из разд. 5.10. Если частица имеет электрический заряд  $e$  и при свободном движении подчиняется уравнению Дирака (6.8), в поле  $A^\mu = (\varphi, \mathbf{A})$  уравнение должно быть модифицировано введением длинных производных (5.68), (5.69),  $\hat{H} \Rightarrow \hat{H} - e\varphi$ ,  $\hat{\mathbf{p}} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$ . В случае уравнения Дирака это приводит к такой подстановке в свободный гамильтониан:

$$\hat{H} = \beta m + (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Rightarrow \beta m + e\varphi + \vec{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}). \quad (6.32)$$

Уравнение Дирака во внешнем поле приобретает вид

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \{ \beta m + e\varphi + \vec{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) \} \Psi, \quad (6.33)$$

или, как обобщение уравнения (6.15),

$$(\hat{p} - e\mathbf{A} - m)\Psi = 0. \quad (6.34)$$

Можно непосредственно проверить, что, поскольку поле  $(\varphi, \mathbf{A})$  вещественно, уравнение непрерывности (6.27) по-прежнему справедливо с теми же выражениями (6.23) для плотности и (6.28) для плотности тока. Так как оператор импульса входит в уравнение линейно, нет так называемого диамагнитного члена  $\sim \mathbf{A}|\Psi|^2$ , в выражении для тока (см. уравнение (I.13.28)), хотя ток изменяется в присутствии поля вследствие изменения волновых функций.

Пусть  $\Psi$  описывает одно из возможных состояний частицы; в стационарном случае это может быть решением с определённой положительной энергией  $E$  и, соответственно, с зависимостью от времени  $\sim \exp(-iEt)$ . Соответствующий античастице двойник с отрицательной энергией должен меняться во времени как  $\exp(iEt)$ . Следовательно, переход к античастицам, *зарядовое сопряжение*, по-видимому, включает операцию комплексного сопряжения. Комплексно сопряжённый биспинор  $\Psi^*$  удовлетворяет уравнению, комплексно сопряжённому к (6.33):

$$-i\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \{\beta^*m + e\varphi + \vec{\alpha}^* \cdot (\hat{\mathbf{p}}^* - e\mathbf{A})\}\Psi^*. \quad (6.35)$$

Отметим, что  $\Psi^*$  все еще биспинорный *столбец*, но с комплексно сопряжёнными компонентами, и обе, временная и пространственная производные, входят с множителем  $i$  и меняют знак ( $\hat{\mathbf{p}}^* = -\hat{\mathbf{p}}$ ), поскольку внешнее поле вещественно. Теперь изменим знак всех членов в (6.35) и умножим уравнение на постоянную  $4 \times 4$  матрицу  $\mathcal{C}$ , которую выберем позже таким образом, чтобы преобразованное уравнение совпало с исходным:

$$i\frac{\partial(\mathcal{C}\Psi^*)}{\partial t} = \{m\mathcal{C}(-\beta^*)\mathcal{C}^{-1} - e\varphi + \mathcal{C}\vec{\alpha}^* \cdot (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})\mathcal{C}^{-1}\}\mathcal{C}\Psi^*. \quad (6.36)$$

В члены, содержащие матрицы, вставлено  $\mathcal{C}^{-1}\mathcal{C} = 1$ , для того чтобы иметь во всех членах новый, *зарядово сопряжённый*, биспинор

$$\Psi_{\mathcal{C}} = \mathcal{C}\Psi^*. \quad (6.37)$$

Зарядово сопряжённый биспинор (6.37) подчиняется тому же уравнению Дирака (6.33), но с противоположным зарядом  $-e$ , если *оператор зарядового*

сопряжения  $\mathcal{C}$  удовлетворяет матричным соотношениям

$$\mathcal{C}(-\beta^*)\mathcal{C}^{-1} = \beta, \quad \mathcal{C}\vec{\alpha}^*\mathcal{C}^{-1} = \vec{\alpha}. \quad (6.38)$$

Очевидно, что такая матрица  $\mathcal{C}$  существует, поскольку матрицы  $\beta' = -\beta^*$  и  $\alpha' = \alpha^*$  удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, что и исходные матрицы, и могут быть получены из них унитарным преобразованием. Такой выбор даже не единственен.

### Задача 6.3

Найти матрицу  $\mathcal{C}$  в стандартном представлении (6.7) матриц Дирака, наложив дополнительное условие

$$\mathcal{C}^\dagger = \mathcal{C} = \mathcal{C}^{-1}. \quad (6.39)$$

**Решение.**

$$\mathcal{C} = i\beta\alpha_2 = i\gamma_2. \quad (6.40)$$

Таким образом, у нас есть пара биспиноров  $\Psi$  и  $\Psi_{\mathcal{C}}$ , описывающих движение (в том же самом внешнем поле) частиц с зарядами  $\pm e$ . Решение  $\Psi_{\mathcal{C}}$  должно принадлежать античастице, если решение  $\Psi$  описывает частицы. Если  $\Psi$  — собственный вектор гамильтониана с энергией  $E$  и все его компоненты имеют одинаковую зависимость от времени  $e^{-iEt}$ , все компоненты биспинора  $\mathcal{C}\Psi^*$  имеют зависимость от времени  $e^{iEt}$ , как для энергии  $-E$ . При свободном движении  $\Psi$  и  $\Psi_{\mathcal{C}}$  — решения того же уравнения с противоположными знаками энергии. Как обсуждалось в разд. 5.8 в связи с релятивистским законом дисперсии, решения с энергиями  $\pm E$  появляются парами. Без внешних полей, действующих на заряд, частицы и античастицы неразличимы. Выполняя операцию зарядового сопряжения над решением с отрицательной энергией, мы получим физическое решение с положительной энергией, фактически совпадающее с решением для частицы. В присутствии внешних полей решение для частицы отлично от решения для античастицы; из решения с  $E < 0$  и заданным зарядом с помощью зарядового сопряжения мы получим решение с  $E > 0$  и противоположным зарядом. Зарядовое сопряжение позволяет использовать вместо решения для электрона с  $e < 0$  и  $E < 0$  решение для позитрона с  $E > 0$  и  $e > 0$ .

### 6.5. Релятивистские преобразования

Физические процессы не зависят от выбора лоренцевой системы отсчёта. Во всех таких системах уравнения для физических законов имеют одну и ту же форму, будучи выраженными через величины, относящиеся к выбранной системе отсчёта. Наши уравнения можно переписать в *ковариантной* форме, которая ясно показывает, что все члены подчиняются единым правилам преобразования.

Используя контравариантный оператор импульса (5.26), запишем уравнение Дирака (6.15) как

$$(i\gamma_\mu \partial^\mu - m)\Psi = 0. \quad (6.41)$$

Теперь выполним преобразование Лоренца (5.29), заданное матрицей  $\Lambda$ . Если бы матрицы  $\gamma_\mu$  преобразовывались как компоненты 4-вектора, то  $\gamma_\mu \partial^\mu$  была бы инвариантом. Тогда волновая функция  $\Psi$  в новой системе отсчета удовлетворяла бы тому же уравнению (6.41), то есть была бы инвариантом (релятивистский *скаляр*). Однако наши величины  $\gamma_\mu$  являются универсальными матрицами, не зависящими от системы отсчёта. Тогда релятивистская ковариантность уравнения Дирака требует, чтобы волновая функция  $\Psi$  преобразовывалась определённым образом. Должно существовать линейное преобразование  $\mathcal{S}$

$$\Psi' = \mathcal{S}\Psi \quad (6.42)$$

такое, что новая функция  $\Psi'$  в новой системе координат удовлетворяет уравнению того же самого вида

$$(i\gamma_\mu \partial'^\mu - m)\Psi' = 0. \quad (6.43)$$

В соответствии с релятивистским законом дисперсии (5.12) масса  $m$  является скаляром; производные  $\partial'^\mu$  относятся к новым координатам.

Матрица  $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\Lambda)$  не может зависеть от координат и должна быть универсальной  $4 \times 4$  матрицей (поскольку биспинор имеет четыре компоненты), полностью определяемой преобразованием Лоренца  $\Lambda$ ; она не сингулярна, поскольку обратное преобразование Лоренца определяет обратную матрицу  $\mathcal{S}^{-1}$ . В уравнении (6.42) новая функция  $\Psi'$  берётся в точке  $x'$ , в то время как старая функция  $\Psi$  берётся в соответствующей, в смысле уравнения

(5.29), точке  $x = \Lambda^{-1}x'$ ,

$$\Psi'_\alpha(x') = \mathcal{S}_\alpha^\beta(\Lambda)\Psi_\beta(\Lambda^{-1}x'). \quad (6.44)$$

Это очевидное обобщение преобразования волновой функции при вращениях, разд. II.1.1. Преобразование 4-градиента даёт (5.27)

$$\partial^\mu\Psi = \frac{\partial\Psi}{\partial x_\mu} = \frac{\partial\Psi}{\partial x'_\nu} \frac{\partial x'_\nu}{\partial x_\mu} = \Lambda_\nu^\mu \partial'^\nu\Psi. \quad (6.45)$$

Используя (6.45) и (6.42), перепишем исходное уравнение Дирака (6.41) как

$$\left(i\Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \partial'^\nu - m\right)\mathcal{S}^{-1}\Psi' = 0, \quad (6.46)$$

или, умножая на матрицу  $\mathcal{S}$  слева,

$$\mathcal{S} i\Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \mathcal{S}^{-1} \partial'^\nu \Psi' - m\Psi' = 0. \quad (6.47)$$

Уравнение (6.47) для преобразованной волновой функции будет удовлетворять условию релятивистской ковариантности, то есть совпадать с (6.41), если

$$\mathcal{S} \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \mathcal{S}^{-1} = \gamma_\nu \quad \rightsquigarrow \quad \mathcal{S}^{-1} \gamma_\nu \mathcal{S} = \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu. \quad (6.48)$$

Это условие, которое определяет матрицу  $\mathcal{S}$ , и, следовательно, правило преобразования (6.42) волновой функции Дирака при преобразованиях Лоренца. Выбор матрицы  $\mathcal{S}$  может быть фиксирован дополнительным условием (фактически нормировкой функции  $\Psi$ ), например,

$$\det \mathcal{S} = 1. \quad (6.49)$$

Нетрудно понять смысл условия (6.48). Если бы волновая функция  $\Psi$  была скаляром ( $\Psi' = \Psi$ ), ковариантность была бы очевидна, для матриц  $\gamma_\mu$ , преобразующихся как 4-вектор:

$$\gamma_\nu \Rightarrow \gamma'_\nu = \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu. \quad (6.50)$$

Теперь мы хотим найти такое преобразование  $\mathcal{S}$ , которое возвращало бы  $\gamma$ -матрицам их исходную форму. Как всегда, при преобразовании (6.42) операторы трансформируются в соответствии с

$$\gamma'_\nu \Rightarrow \gamma''_\nu = \mathcal{S} \gamma'_\nu \mathcal{S}^{-1} = \mathcal{S} \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \mathcal{S}^{-1}. \quad (6.51)$$

Требование  $\gamma''_\nu = \gamma_\nu$  и есть условие ковариантности (6.48).

## 6.6. Оператор спина

Возможные преобразования координат системы отсчёта включают обычные трёхмерные вращения. Генератор такого преобразования связан со спином дираковской частицы.

Здесь простая техника состоит в прямом обобщении того, что было сделано для нерелятивистской частицы в разд. II.1.2. Мы проиллюстрируем это, найдя матрицы  $\mathcal{S}$  для вращения:  $\mathcal{S} \equiv \mathcal{R}_z(\varphi)$ . Для бесконечно малого угла поворота  $\delta\varphi$ , в соответствии с разд. II.1.1,

$$x' = x - y\delta\varphi, \quad y' = y + x\delta\varphi, \quad z' = z, \quad t' = t. \quad (6.52)$$

Матрица преобразования  $\Lambda$  в окрестности начала координат может быть записана как

$$\Lambda = 1 + \delta\varphi \cdot \lambda, \quad (6.53)$$

где  $4 \times 4$  матрица  $\lambda$  с матричными элементами  $\lambda_\nu^\mu$  играет роль генератора преобразования. Уравнение (6.52) показывает, что

$$\lambda_1^2 = -\lambda_2^1 = -1. \quad (6.54)$$

Матрица  $\mathcal{R}$  также близка к единичной матрице,

$$\mathcal{R} = 1 + \delta\varphi \cdot \tau, \quad (6.55)$$

где матрицу  $\tau$  нужно ещё определить. С той же точностью  $\mathcal{R}^{-1} = 1 - \delta\varphi \cdot \tau$  и

$$\mathcal{R}^{-1}\gamma_\nu\mathcal{R} = (1 - \delta\varphi \cdot \tau)\gamma_\nu(1 + \delta\varphi \cdot \tau) = \gamma_\nu + \delta\varphi[\gamma_\nu, \tau]. \quad (6.56)$$

С другой стороны, уравнения (6.48) и (6.53) требуют, чтобы это совпадало с

$$\Lambda_\nu^\mu\gamma_\mu = \gamma_\nu + \delta\varphi\lambda_\nu^\mu\gamma_\mu. \quad (6.57)$$

Таким образом, матрица  $\tau$  должна удовлетворять условию

$$[\gamma_\nu, \tau] = \lambda_\nu^\mu\gamma_\mu \quad (6.58)$$

или явно

$$[\gamma_1, \tau] = -\gamma_2, \quad [\gamma_2, \tau] = \gamma_2. \quad (6.59)$$

Решением этих уравнений является

$$\tau = \frac{1}{2} \gamma_1 \gamma_2 + \eta, \quad (6.60)$$

где  $\eta$  — матрица, коммутирующая с  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ . Однако нормировка (6.49) требует выполнения условий

$$\det(1 + \delta\varphi \tau) = 1 + \delta\varphi \operatorname{tr}(\tau) = 1, \quad \rightsquigarrow \quad \operatorname{tr}(\tau) = 0, \quad (6.61)$$

которые исключают матрицу  $\eta$  и дают

$$\tau = \frac{1}{2} \gamma_1 \gamma_2. \quad (6.62)$$

В стандартном представлении (6.9) этот результат имеет вид

$$\tau = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_1 \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \sigma_2 \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}. \quad (6.63)$$

Теперь естественно определить оператор спина дираковской частицы как

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \Sigma, \quad (6.64)$$

где релятивистские  $4 \times 4$  матрицы спина

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (6.65)$$

Таким образом, генератор вращений определяется аналогично нерелятивистскому случаю

$$\tau = -\frac{i}{2} \Sigma_3 = -i \hat{s}_3, \quad (6.66)$$

и так же для вращения вокруг других осей.

Алгебра  $4 \times 4$  матриц  $\Sigma_i$  не отличается от алгебры матриц Паули. Как обычно, мы можем восстановить унитарный оператор конечного вращения

$$\mathcal{R}_z(\varphi) = e^{\varphi \tau} = e^{-i\varphi \hat{s}_3} = e^{-(i/2)\varphi \Sigma_3} = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \Sigma_3. \quad (6.67)$$

Как и должно быть для частицы со спином  $1/2$ , см. разд. II.5, вращение на полный угол  $2\pi$  даёт  $\mathcal{R}_z(\varphi + 2\pi) = -\mathcal{R}_z(\varphi)$ .

#### Задача 6.4

Найти преобразование  $\mathcal{S}(v_x)$  волновой функции Дирака, отвечающее лоренцеву преобразованию — бусту, переходу к системе отсчета, движущейся со скоростью  $v$  вдоль оси  $x$  относительно исходной системы.

#### Решение.

Решение аналогично случаю вращения, но получающаяся матрица не унитарна,

$$\mathcal{S}(v_x) = \cosh \frac{\xi}{2} + \alpha_1 \sinh \frac{\xi}{2}, \quad \tanh \xi = v \quad (6.68)$$

или  $\tanh \xi = v/c$  в обычных единицах; величина  $\xi$  носит название *быстрота* (rapidity).

Отсутствие унитарности в представлении группы Лоренца отражает характер преобразований. В противоположность вращению с компактными непрерывными параметрами, углами, «угол» буста  $\xi$  не компактен, он изменяется от  $-\infty$  до  $+\infty$ . В практических задачах этот параметр может быть удобен, потому что если буст происходит вдоль той же оси в два приема, с параметрами  $\xi_1$  и  $\xi_2$ , то полный буст аддитивен,  $\xi = \xi_1 + \xi_2$ , в противоположность более сложному лоренцевскому сложению скоростей.

### 6.7. Билинейные ковариантные комбинации

Теперь нужно определить, как наблюдаемые физические величины (матричные элементы различных операторов) трансформируются при преобразованиях Лоренца. Начнем с величины, правило преобразования которой может быть установлено на основе общих соображений.

4-вектор тока  $j^\mu$  (6.31) должен преобразовываться так же, как вектор координат  $x^\mu$  (5.5). Используя сопряжённый спинор Дирака  $\bar{\Psi}$  и совершая преобразование Лоренца  $\Lambda$ , получим

$$j^\mu \Rightarrow j'^\mu = \Lambda^\mu_\nu j^\nu = \Lambda^\mu_\nu \bar{\Psi} \gamma^\nu \Psi = \bar{\Psi} (\Lambda^\mu_\nu \gamma^\nu) \Psi, \quad (6.69)$$

где матрицы  $\gamma^\nu$  определены в соответствии со стандартным правилом (5.21). Из условия (6.48) лоренцевой ковариантности уравнения Дирака следует, что

$$j'^\mu = \bar{\Psi} S^{-1} \gamma^\mu S \Psi. \quad (6.70)$$

Преобразование сопряжённого спинора даётся выражением

$$\bar{\Psi}' = (\Psi)^\dagger \gamma_0 = \Psi^\dagger \mathcal{S}^\dagger \gamma_0 = \bar{\Psi} \gamma_0 \mathcal{S}^\dagger \gamma_0. \quad (6.71)$$

Следовательно, преобразование вектора тока должно иметь вид

$$j'^\mu = \bar{\Psi}' \gamma^\mu \Psi' = \bar{\Psi} \gamma_0 \mathcal{S}^\dagger \gamma_0 \gamma^\mu \mathcal{S} \Psi. \quad (6.72)$$

Два выражения, (6.70) и (6.72), совпадают, если

$$\gamma_0 \mathcal{S}^\dagger \gamma_0 = \mathcal{S}^{-1}. \quad (6.73)$$

Ниже мы покажем, что это соотношение верно.

### Задача 6.5

Доказать, что оператор  $\mathcal{S} \gamma_0 \mathcal{S}^\dagger \gamma_0$  коммутирует со всеми матрицами  $\gamma_\mu$ .

### Решение.

Запишем условие релятивистской ковариантности для биспинора  $\Psi^\dagger$  и используем свойства эрмитова сопряжения, разд. 6.2:

$$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_0 \gamma_\mu \gamma_0. \quad (6.74)$$

Существуют 16 линейно независимых  $4 \times 4$  матриц. Мы можем выбрать базис в этом операторном пространстве следующим образом: единичная матрица  $\hat{1}$  — *скаляр*; 4 матрицы  $\gamma_\mu$  — *вектор*; 6 матриц

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] = -\sigma_{\nu\mu} \quad (6.75)$$

— *антисимметричный тензор*; 4 матрицы  $i\gamma_\mu \gamma_5$  — *псевдовектор* (см. определение (6.16) матрицы  $\gamma_5$ ); матрица  $\gamma_5$  — *псевдоскаляр*; множитель  $i$  добавлен для эрмитовости. Смысл этих терминов будет ясен несколько позже, но очевидно, что только единичная матрица коммутирует со всеми  $\gamma_\mu$  (формально это можно утверждать, ссылаясь на лемму Шура, разд. I.8.12). Следовательно, результат задачи 6.5 показывает, что

$$\mathcal{S} \gamma_0 \mathcal{S}^\dagger \gamma_0 = \eta = \text{const} \cdot \hat{1}. \quad (6.76)$$

Теперь мы можем найти константу  $\eta$ . Во-первых, матрица  $\mathcal{S} \gamma_0 \mathcal{S}^\dagger$  очевидно эрмитова. Тогда из (6.76) следует, что  $\eta \gamma_0$  тоже эрмитова, т.е. величина  $\eta$

вещественна. Поскольку  $\det \mathcal{S} = 1$ , мы имеем

$$\det (\mathcal{S}\gamma_0\mathcal{S}^\dagger\gamma_0) = |\det \mathcal{S}|^2 \cdot |\det (\gamma_0)|^2 = 1 = \eta^4. \quad (6.77)$$

Это даёт, что  $\eta = \pm 1$ . Остается понять смысл знака  $\eta$ . Записав снова (6.76) как  $\mathcal{S}\gamma_0\mathcal{S}^\dagger = \eta\gamma_0$  и умножая слева и справа на обратный оператор, мы находим

$$(\mathcal{S}^\dagger)^{-1}\gamma_0\mathcal{S}^{-1} = \frac{1}{\eta}\gamma_0 \rightsquigarrow \eta\gamma_0\mathcal{S}^{-1} = \mathcal{S}^\dagger\gamma_0, \quad (6.78)$$

и, следовательно,

$$\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S} = \mathcal{S}^\dagger\gamma_0\gamma_0\mathcal{S} = \eta\gamma_0\mathcal{S}^{-1}\gamma_0\mathcal{S}. \quad (6.79)$$

Используя условие лоренцевской ковариантности (6.48), получим

$$\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S} = \eta\gamma_0\Lambda_0^\mu\gamma_\mu = \eta(\gamma_0\Lambda_0^0\gamma_0 - \gamma_0\Lambda_0^k\gamma_k) = \eta(\Lambda_0^0 - \Lambda_0^k\alpha_k). \quad (6.80)$$

Однако оператор  $\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S}$  по построению имеет вещественные положительные собственные значения, поэтому его след положителен. В соответствии с (6.80) имеем

$$\text{tr}(\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S}) = 4\eta\Lambda_0^0 \geq 0. \quad (6.81)$$

Отсюда мы заключаем, что  $\eta = +1$ , если  $\Lambda_0^0 > 0$ , т. е. для преобразований, которые не содержат обращения времени, и  $\eta = -1$ , если  $\Lambda_0^0 < 0$  для преобразований, включающих обращение времени.

Таким образом, для преобразований, которые не обращают стрелку времени, уравнение (6.73) справедливо, и ток  $j^\mu$  поистине ведет себя как 4-вектор (ток меняет знак при обращении времени). Легко видеть, что любой матричный элемент вида

$$V^\mu = \bar{\Psi}_1\gamma^\mu\Psi_2 \quad (6.82)$$

преобразуется как 4-вектор. Плотность вероятности (6.23) является четвёртой компонентой вектора, а не скаляром, см. также обсуждение в конце разд. 5.7. Следовательно, наша обычная нормировка  $\Psi^\dagger\Psi = 1$  не является релятивистски инвариантной.

*Инвариантная нормировка* возможна для матричного элемента  $\bar{\Psi}\Psi$ , который аналогичен току, но вместо «векторных» матриц  $\gamma^\mu$  использует «скалярную» матрицу  $\hat{1}$ . Используя уравнения (6.71) и (6.73), получим (для преобразований без обращения времени)

$$\bar{\Psi}' = \bar{\Psi}\mathcal{S}^{-1} \quad (6.83)$$

и

$$\bar{\Psi}'_1 \Psi'_2 = \bar{\Psi}_1 \mathcal{S}^{-1} \mathcal{S} \Psi_2 = \bar{\Psi}_1 \Psi_2. \quad (6.84)$$

Матричные элементы «тензорного» оператора (6.75)

$$T_{\mu\nu} = \bar{\Psi}_1 \sigma_{\mu\nu} \Psi_2 \quad (6.85)$$

преобразуются как компоненты антисимметричного тензора второго ранга

$$T'_{\mu\nu} = \bar{\Psi}_1 \sigma_{\mu\nu} \Psi'_2 = \bar{\Psi}_1 \mathcal{S}^{-1} \sigma_{\mu\nu} \mathcal{S} \Psi_2 \quad (6.86)$$

и, используя условие ковариантности (6.48),

$$T'_{\mu\nu} = \Lambda_\mu^\rho \Lambda_\nu^\tau \bar{\Psi}_1 \sigma_{\rho\tau} \Psi_2 = \Lambda_\mu^\rho \Lambda_\nu^\tau T_{\rho\tau}. \quad (6.87)$$

**Задача 6.6**Показать, что матричные элементы «псевдоскалярного» оператора  $\gamma_5$ 

$$P = \bar{\Psi}_1 \gamma_5 \Psi_2 \quad (6.88)$$

преобразуются при преобразовании Лоренца  $\Lambda$  как

$$P \Rightarrow P' = \bar{\Psi}'_1 \gamma_5 \Psi'_2 = P \cdot \det \Lambda. \quad (6.89)$$

Детерминант матрицы  $\Lambda$  является якобианом перехода от старых координат к новым. Якобиан определяет изменение элемента объема. Для *непрерывных* преобразований Лоренца (без отражений пространства или времени) 4-объем инвариантен [3], и якобиан равен 1. Тогда  $P' = P$ . Для преобразований с инверсией одной из трех координатных осей,  $\det \Lambda = -1$ , и  $P' = -P$ , т. е. матричные элементы (6.88) в самом деле обладают свойствами псевдоскаляра. Аналогично можно показать, что «псевдовекторные» матричные элементы

$$A^\mu = \bar{\Psi}_1 \gamma^\mu \gamma_5 \Psi_2 \quad (6.90)$$

ведут себя как компоненты аксиального вектора (как истинный вектор при вращениях и бустах, но не меняя знака при пространственных инверсиях).

Мы можем заключить, что операторы всех физических наблюдаемых для дираковской частицы можно классифицировать в соответствии с их свойствами по отношению к преобразованиям Лоренца. Эти свойства не зависят от того, совпадают ли биспиноры  $\bar{\Psi}$  и  $\Psi$  или описывают различные

состояния, или даже различные дираковские частицы. Если гамильтониан взаимодействия двух таких частиц сохраняет чётность, он должен быть *скаляром*. Тогда он может быть построен свёрткой величин с одинаковыми трансформационными свойствами, например, как (вектор  $\times$  вектор)

$$(V^\mu)_{12}(V_\mu)_{34} = (\bar{\Psi}_1 \gamma^\mu \Psi_2)(\bar{\Psi}_3 \gamma_\mu \Psi_4) \quad (6.91)$$

или (псевдовектор  $\times$  псевдовектор)

$$(A^\mu)_{12}(A_\mu)_{34} = (\bar{\Psi}_1 \gamma^\mu \gamma_5 \Psi_2)(\bar{\Psi}_3 \gamma_\mu \gamma_5 \Psi_4). \quad (6.92)$$

Если гамильтониан не сохраняет чётность, можно также иметь взаимодействие типа (вектор  $\times$  псевдовектор)

$$(V^\mu)_{12}(A_\mu)_{34} + (\text{э.с.}). \quad (6.93)$$

Это случай слабого взаимодействия, которое может быть сконструировано как произведение токов  $J^\mu = V^\mu - A^\mu$ , которые содержат перекрёстные члены (6.93).

**Дополнительная литература:** [30], [32], [35], [36], [37]

Физическая теория считается удовлетворительной, если с её помощью мы можем сделать количественные предсказания физических величин.

*Дж. М. Яух, Ф. Рорлих. «Теория фотонов и электронов»*

## Глава 7

### Уравнение Дирака: решения

#### 7.1. Свободное движение

Мы начнём с основной задачи о свободном движении дираковской частицы с массой  $m \neq 0$ . Для нахождения стационарного состояния с энергией  $E$ , нужно стандартным образом выделить зависимость от времени, записав биспинорное решение как

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt}. \quad (7.1)$$

Независящий от времени биспинор  $\psi(\mathbf{r})$  удовлетворяет стационарному уравнению Дирака

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (7.2)$$

с гамильтонианом (6.2)

$$\hat{H} = \beta m + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}). \quad (7.3)$$

Оператор импульса  $\hat{\mathbf{p}}$ , очевидно, сохраняется, и решение можно взять в виде плоской волны

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}u(\mathbf{p}), \quad (7.4)$$

где  $\mathbf{p}$  теперь — собственное значение импульса, а  $u(\mathbf{p})$  — числовой биспинор, являющийся решением алгебраической задачи на собственные значения

$$\{\beta m + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})\}u(\mathbf{p}) = Eu(\mathbf{p}). \quad (7.5)$$

Другая форма этого уравнения следует из (6.15):

$$(\underline{p} - m)u = 0, \quad (7.6)$$

где 4-вектор импульса  $p^\mu = (E, \mathbf{p})$ . Уравнение (7.5) в действительности есть система из четырёх связанных линейных однородных уравнений для компонент биспинора  $u$ ; форма (7.6) даёт лишь другие комбинации тех же уравнений.

Мы «вывели» уравнение Дирака в разд. 6.1 из требования, чтобы каждая компонента многокомпонентной волновой функции удовлетворяла УКГ. Уравнение Дирака напоминает квадратный корень из УКГ. Переходя опять к квадратичному оператору путём умножения (7.5) на оператор  $(\beta m + (\alpha \cdot \mathbf{p}))$ , с помощью уравнений (6.5) и (6.6) мы убираем матрицы и получаем положительные и отрицательные собственные значения энергии,

$$E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2 \quad \rightsquigarrow \quad E = \pm E_{\mathbf{p}} = \pm \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (7.7)$$

Теперь нужно проверить, что оба знака на самом деле возможны и появляются *парамми*, т. е. для каждого собственного вектора  $u$  с одним из собственных значений  $E$  уравнения (7.7) существует другой собственный вектор с собственным значением  $-E$ . Это может быть установлено с помощью зарядового сопряжения (разд. 6.4).

## 7.2. Море Дирака

Преобразуем уравнение Дирака аналогично тому, как это было сделано в уравнениях (6.35) и (6.36). Ожидая, что античастицы в том же поле движутся в направлении, обратном движению частиц, сначала изменим  $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$  в уравнении Дирака (7.5)

$$(\beta m - (\alpha \cdot \mathbf{p}))u(-\mathbf{p}) = Eu(-\mathbf{p}). \quad (7.8)$$

Теперь возьмём комплексное сопряжение и изменим общий знак:

$$(-\beta^* m + (\alpha^* \cdot \mathbf{p}))u^*(-\mathbf{p}) = -Eu^*(-\mathbf{p}). \quad (7.9)$$

После этого зарядовое сопряжение (разд. 6.4) даёт

$$(\mathcal{C}(-\beta^*)\mathcal{C}^{-1}m + (\mathcal{C}\alpha^*\mathcal{C}^{-1} \cdot \mathbf{p}))\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}) - E\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}). \quad (7.10)$$

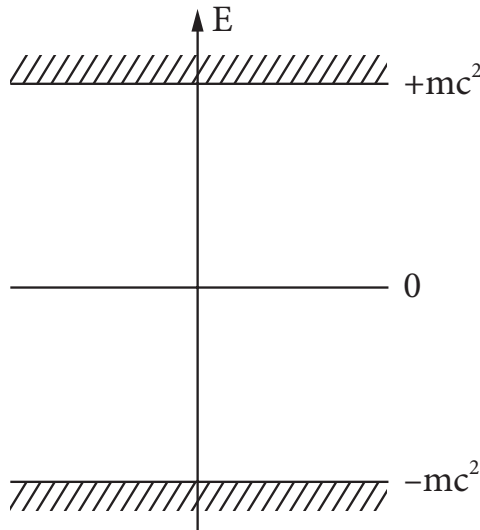


Рис. 7.1. Энергетический спектр уравнения Дирака для свободного движения

С определением (6.38) преобразования  $\mathcal{C}$  результирующее уравнение имеет вид

$$\left( (\beta m + (\alpha \cdot \mathbf{p})) \right) \left( \mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}) \right) = -E \left( \mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}) \right). \quad (7.11)$$

Это означает, что для каждого биспинора  $u(\mathbf{p})$  с энергией  $E$  существует другой биспинор  $\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p})$ , который является решением того же свободного уравнения Дирака с энергией  $-E$ . Из четырёх линейно независимых решений для заданного вектора  $\mathbf{p}$  два отвечают энергии  $E = E_{\mathbf{p}} > 0$ , а два — энергии  $E = -E_{\mathbf{p}} < 0$ . Разрешённый спектр энергии свободного движения (рис. 7.1) состоит из *двух континуумов с энергетической щелью* от  $-mc^2$  до  $+mc^2$ . Эта картина, понятая буквально, не может быть удовлетворительной с физической точки зрения. Электроны с  $E > 0$  в присутствии третьего тела могут испустить фотоны с энергией  $> 2mc^2$  и совершить переход в континуум, который не имеет дна. Как обсуждалось в разд. 6.4, разумная интерпретация состоит в том, что решения с положительной энергией описывают *частицу*, электрон, а вместо решений с отрицательной энергией нужно брать их зарядово сопряжённые биспиноры, описывающие *античастицу* — позитрон:

$$u_{\text{el}}(\mathbf{p}, E > 0) = u(\mathbf{p}, E_{\mathbf{p}}), \quad u_{\text{pos}}(\mathbf{p}, E > 0) = \mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}, -E_{\mathbf{p}}). \quad (7.12)$$

Первоначальная интерпретация состояний с отрицательной энергией, предложенная Дираком, состоит в следующем. Предположим, что в основном состоянии мира все состояния с отрицательной энергией заполнены однородным электронным фоном — это *море Дирака*. Будучи абсолютно однородным, фон не влияет на результаты экспериментов с низкой энергией из-за широкой энергетической щели. Существование заполненного моря делает переход электронов в эти состояния запрещённым согласно *принципу исключения Паули*, разд. 9.4. Внешнее поле достаточно высокой частоты,  $\omega > 2mc^2/\hbar$ , может перебросить электрон фона в верхний континуум. Это будет наблюдаться как появление частицы с  $E > 0$  и *дырки* в состоянии с  $E < 0$ . Во внешнем электромагнитном поле все электроны движутся в одном направлении для энергий обоих знаков. Но это означает, что дырка в фоне движется в противоположном направлении, как это делал бы позитрон.

Новая интерпретация с помощью зарядового сопряжения помогает избежать введения ненаблюдаемого моря электронов. Возбуждение электрона из нижнего континуума в верхний теперь естественно интерпретируется как *рождение электрон-позитронной пары* внешним полем. Обратный процесс заполнения состояния дырки электроном — это *аннигиляция* пары. Однако сама возможность таких процессов налагает ограничение на интерпретацию электрона во внешнем поле как *одночастичного* состояния. При высоких частотах поля число частиц перестаёт быть фиксированным, и тогда необходимо решать *задачу многих тел* для электрона и электрон-позитронных пар. Это приводит к наблюдаемым эффектам КЭД, имеющим отношение к релятивистским соотношениям неопределённости (разд. I.5.10, 5.1).

### 7.3. Решения для свободного движения

Теперь можно найти решение уравнения Дирака (7.5) для свободного движения. Имея в виду будущий переход к нерелятивистскому пределу, удобно ввести два *двухкомпонентных* спинора  $\varphi, \chi$  вместо четырёхкомпонентного биспинора  $u$ . Сгруппируем две верхних и две нижних компоненты в виде

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (7.13)$$

В стандартном представлении матриц Дирака (6.7) уравнение (7.5) принимает вид

$$E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} - m \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} = 0. \quad (7.14)$$

Мы получили систему двух связанных уравнений для спиноров  $\varphi$  и  $\chi$ :

$$E\varphi - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\chi = m\varphi, \quad E\chi - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi = -m\chi \quad (7.15)$$

и можем выразить один из спиноров через другой:

$$\chi = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E + m} \varphi, \quad \varphi = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E - m} \chi. \quad (7.16)$$

Условие разрешимости этой однородной системы снова приводит к собственным значениям энергии (7.7). Решение содержит произвольный двухкомпонентный спинор. Например, при произвольном  $\varphi$  найдем  $\chi$  для  $E = \pm E_{\mathbf{p}}$ . Двукратное вырождение состояний с определённым знаком энергии связано с произвольностью двухкомпонентного спинора, т. е. с существованием двух независимых внутренних состояний частицы,

$$\varphi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \varphi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.17)$$

Эти два внутренних состояния соответствуют спину  $1/2$  дираковской частицы.

Преимущество стандартного представления дираковских матриц становится очевидным, если интересоваться *нерелятивистским пределом*  $v \ll c$ . Для положительной энергии  $E = E_{\mathbf{p}} > mc^2$ ; в этом пределе  $E - mc^2 \ll mc^2$ . Тогда из уравнения (7.16) следует, что верхние компоненты биспинора много больше нижних:

$$\chi \approx \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2m} \varphi \sim \frac{v}{c} \varphi. \quad (7.18)$$

Наоборот, для решений с отрицательной энергией  $E = -E_{\mathbf{p}}$  верхние компоненты малы:  $\varphi \sim (v/c)\chi$ . В системе покоя частицы  $\mathbf{p} = 0$  один из спиноров исчезает, а оставшиеся две компоненты обеспечивают обычное нерелятивистское описание для частицы со спином  $1/2$ .

Для нерелятивистских приложений мы можем использовать нековариантную нормировку биспинора

$$(u^\dagger u) = 1. \quad (7.19)$$

Для решения с положительной энергией биспинор равен (уравнение (7.16))

$$u(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \varphi \\ ((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})/(E + m))\varphi \end{pmatrix}. \quad (7.20)$$

Теперь

$$\begin{aligned} (u^\dagger u) &= |N|^2 \left( \varphi^\dagger, \varphi^\dagger \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E + m} \right) \begin{pmatrix} \varphi \\ ((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})/(E + m))\varphi \end{pmatrix} \\ &= |N|^2 \left[ 1 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2}{(E + m)^2} \right] (\varphi^\dagger \varphi). \end{aligned} \quad (7.21)$$

Полагая двухкомпонентный спинор нормированным,  $(\varphi^\dagger \varphi) = 1$ , используя (7.19) и алгебру матриц Паули (II.5.16), находим

$$(u^\dagger u) = |N|^2 \left[ 1 + \frac{p^2}{(E + m)^2} \right] = |N|^2 \frac{2E}{E + m}. \quad (7.22)$$

Окончательно решение с положительной энергией, нормированное в соответствии с (7.19), даётся выражением

$$u(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{E + m}{2E}} \begin{pmatrix} \varphi \\ ((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})/(E + m))\varphi \end{pmatrix}. \quad (7.23)$$

### Задача 7.1

Используя гейзенберговские операторные уравнения движения, найти оператор скорости для дираковской частицы и его собственные значения.

#### Решение.

Оператор скорости может быть определён как

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \dot{\mathbf{r}} = -i[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] = -i[\hat{\mathbf{r}}, (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})] = \boldsymbol{\alpha} \quad (7.24)$$

или  $\boldsymbol{\alpha}$  в обычных единицах. Легко видеть, что собственные значения всех дираковских матриц равны  $\pm 1$ , т. е. собственные значения компонент скорости равны  $\pm c$ .

Парадоксальный результат задачи 7.1 может быть осознан в рамках общей картины, если заметить, что собственное состояние какой-либо компоненты скорости или, иными словами, соответствующей матрицы Дирака  $\alpha_k$

нестационарно. Такое состояние является суперпозицией решений с положительными и отрицательными энергиями, поскольку оператор  $\alpha_k$  смешивает верхние и нижние компоненты. Для такого состояния  $|\Psi|^2$  содержит быстроосциллирующие члены с разностью частот  $(+E_p) - (-E_p) = 2E_p > 2m$ , так называемое *Zitterbewegung* (дрожжащее движение). Оно может вольно интерпретироваться как квантовые флуктуации, связанные с рождением и аннигиляцией виртуальных пар, сравните с дарвиновским членом, разд. II.8.3. Уравнение (7.24) показывает, что различные компоненты скорости не коммутируют аналогично тому, что имеет место для частицы в магнитном поле, уравнение (I.13.20). Здесь эффективное «поле» создаётся спином частицы и взаимодействие спина с пространственным движением является свойством, неизбежно присущим дираковским частицам в релятивистской области.

### Задача 7.2

Найти среднее значение скорости дираковской частицы в стационарном состоянии.

### Решение.

Прямое вычисление среднего значения оператора (7.24) по состоянию (7.23) с положительной энергией даёт

$$\langle \mathbf{v} \rangle = (u^\dagger \boldsymbol{\alpha} u) \frac{E + m}{2E} \left( \varphi^\dagger, \varphi^\dagger \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E + m} \right) \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ ((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})/(E + m))\varphi \end{pmatrix}, \quad (7.25)$$

что приводит к правильному релятивистскому выражению для скорости свободного движения с импульсом  $\mathbf{p}$

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \left( \varphi^\dagger \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2E} \varphi \right) = \frac{\mathbf{p}}{E}. \quad (7.26)$$

## 7.4. Полный набор решений

Множество решений для свободного движения с импульсом  $\mathbf{p}$  дополняется до полного набора добавлением решения с *отрицательной* энергией  $E = -E_p$ , которое может быть найдено тем же способом.

### Задача 7.3

Построить нормированные биспиноры  $v(\mathbf{p})$  с отрицательной энергией и проверить их ортогональность к биспинорам  $u(\mathbf{p})$  с положительной энергией и тем же импульсом  $\mathbf{p}$ .

**Решение.**

С нормировкой  $(v^\dagger v) = 1$  и  $(\chi^\dagger \chi) = 1$

$$v(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{|E| + m}{2|E|}} \begin{pmatrix} -((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})/(|E| + m))\chi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (7.27)$$

Чтобы определить два ортогональных двухкомпонентных спинора для каждого знака энергии, внутренний спин может быть квантован на любую ось. Одна из возможностей, особенно удобная для высоких энергий, состоит в том, чтобы использовать в качестве оси квантования направление импульса  $\mathbf{p}$ . Проекция спина частицы на направление движения называется *спиральностью*. Соответствующий оператор имеет вид

$$\hat{h}_{\mathbf{p}} = \frac{(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p})}{|\mathbf{p}|}, \quad (7.28)$$

где  $\boldsymbol{\Sigma}$  — релятивистский аналог матриц Паули (6.65). Собственные значения спиральности равны  $\pm 1$ , что соответствует состояниям с правой или левой *продольной поляризацией*, аналогично круговой поляризации для фотонов.

**Задача 7.4**

Вывести операторное уравнение движения для оператора  $\boldsymbol{\Sigma}$  свободной дираковской частицы и показать, что спиральность сохраняется (аксиальная симметрия вокруг направления движения).

**Решение.**

Для гамильтониана (6.2) оператор  $\boldsymbol{\Sigma}$  не коммутирует с оператором скорости  $\boldsymbol{\alpha}$ ,

$$[\Sigma_i, \alpha_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = 2i\varepsilon_{ijk}\alpha_k, \quad (7.29)$$

где используется коммутатор  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ . Отсюда

$$[\boldsymbol{\Sigma}, \hat{H}] = -2i[\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]. \quad (7.30)$$

При свободном движении импульс сохраняется и может быть заменён его собственным значением  $\mathbf{p}$ . Тогда

$$[(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}), \hat{H}] = 0, \quad (7.31)$$

спиральность сохраняется и может быть использована, чтобы различить два линейно независимых состояния с заданными  $\mathbf{p}$  и  $E$ .

Можно также ввести операторный символ  $\hat{\zeta}_{\mathbf{p}}$ , который определяет знак энергии для заданного  $\mathbf{p}$ :

$$\hat{\zeta}_{\mathbf{p}} = \frac{\hat{H}}{E_{\mathbf{p}}}, \quad E_{\mathbf{p}} = +\sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (7.32)$$

Собственные значения  $\hat{\zeta}$  также равны  $\pm 1$ . Четыре возможных комбинации значений спиральности и  $\zeta$  определяют полный базис  $\psi_{\mathbf{p}\zeta h}$ .

В итоге полный набор решений уравнения Дирака для свободного движения может быть выбран как

$$\Psi_{\mathbf{p}\zeta h}(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}) - i\zeta E_{\mathbf{p}}t} u_{\zeta h}(\mathbf{p}), \quad (7.33)$$

где биспинор  $u_{\zeta h}(\mathbf{p})$  задан выражениями (7.23) для  $\zeta = 1$  и (7.27) для  $\zeta = -1$  соответственно. Квантовое число  $h$  фиксирует внутренний двухкомпонентный спинор и может быть взято, например, в представлении спиральности. Функции (7.33) одновременно являются собственными функциями следующих операторов:

$$\hat{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}, \quad (7.34)$$

$$\hat{H} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = \zeta E_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}, \quad (7.35)$$

$$\hat{\zeta}_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = \zeta \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}, \quad (7.36)$$

$$\hat{h}_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = h \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}. \quad (7.37)$$

Явный вид биспиноров  $u$  зависит от представления дираковских матриц. Биспиноры могут быть нормированы, например, согласно

$$(u_{\zeta' h'}^\dagger(\mathbf{p}) u_{\zeta h}(\mathbf{p})) = \delta_{\zeta' \zeta} \delta_{h' h}. \quad (7.38)$$

(Важно помнить, что для *инвариантной* нормировки должен использоваться скаляр  $\bar{u}u$ , уравнение (6.84).) Общее решение уравнения Дирака выражается суперпозицией

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta=\pm 1} \sum_{h=\pm 1} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} a_{\zeta h}(\mathbf{p}) u_{\zeta h}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}) - \zeta E_{\mathbf{p}}t}, \quad (7.39)$$

где коэффициенты  $a_{\zeta h}(\mathbf{p})$  определяются исходным биспинором  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ ,

$$a_{\zeta h}(\mathbf{p}) = \int d^3r e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})} u_{\zeta h}^\dagger(\mathbf{p}) \Psi(\mathbf{r}, 0). \quad (7.40)$$

### Задача 7.5

Показать, что преобразование Фолди–Вотхойзена [38]

$$\Psi' = \hat{U}\Psi, \quad \hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}, \quad (7.41)$$

где

$$\hat{U} = e^{i\hat{F}}, \quad \hat{F} = -\frac{i}{2p} \beta(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) \tan^{-1} \left( \frac{p}{m} \right), \quad (7.42)$$

$\beta$  и  $\boldsymbol{\alpha}$  — матрицы Дирака (6.7) и  $p = |\mathbf{p}|$ , приводит уравнение Дирака для свободного движения с импульсом  $\mathbf{p}$  к виду, в котором решения с положительной и отрицательной энергией явно разделены.

### Решение.

Преобразованный гамильтониан (7.41) даётся выражением

$$\hat{H}' = e^{i\hat{F}} \left( \beta m + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) \right) e^{-i\hat{F}} = \beta \sqrt{m^2 + p^2}, \quad (7.43)$$

и в стандартном представлении (6.7) мы получаем два несвязанных двухкомпонентных уравнения для энергий  $\pm E_{\mathbf{p}}$ . Для доказательства можно использовать эквивалентную форму

$$\hat{F} = -\frac{1}{2} \tan^{-1} \left( i\beta \frac{(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})}{m} \right) \quad (7.44)$$

и степенной ряд для арктангенса с учётом того, что

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 = p^2. \quad (7.45)$$

## 7.5. Уравнение Паули

В нерелятивистской квантовой теории уравнение Паули (задача П.8.6) даёт хорошее предсказание для спинового гиромагнитного отношения электрона (или позитрона). Наша задача состоит в том, чтобы вывести уравнение Паули из релятивистского уравнения Дирака.

Уравнение Паули не включает какой-либо явной ссылки на море Дирака для отрицательных энергий. В нерелятивистском пределе,  $v/c \ll 1$ , нижние компоненты биспинора были малы для свободного движения. Теперь нам нужно рассмотреть полное уравнение Дирака (6.33) в присутствии внешнего электромагнитного потенциала  $(A_0, \mathbf{A})$ . Выпишем это уравнение (для стационарного случая с энергией  $E$ ) в терминах двухкомпонентных биспиноров  $\varphi(\mathbf{r})$  и  $\chi(\mathbf{r})$ ; для того чтобы отслеживать релятивистский параметр  $v/c$ , мы вернёмся к полным единицам:

$$(E - eA_0 - mc^2)\varphi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\chi, \quad (7.46)$$

$$(E - eA_0 + mc^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi. \quad (7.47)$$

Рассмотрим решение для положительной энергии

$$E = mc^2 + \varepsilon, \quad (7.48)$$

где  $|\varepsilon| \ll mc^2$  в нерелятивистской области. Влияние нижних компонент

$$\chi = \frac{1}{2mc^2 + \varepsilon - eA_0} c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi \quad (7.49)$$

будет мало, если потенциалы не сдвигают энергию слишком далеко от границы верхнего континуума и не имеют высоких компонент Фурье, пространственных с  $k > mc/\hbar$  или временных с  $\omega > mc^2/\hbar$ . Тогда нижний спинор порядка  $v/c$  по сравнению с верхним и, пренебрегая эффектами высших порядков, мы можем положить

$$\chi \approx \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)}{2mc} \varphi. \quad (7.50)$$

Выражение (7.50), используемое в правой части уравнения (7.46), приводит к замкнутому уравнению для верхнего спинора, большого в нерелятивистском пределе

$$\varepsilon\varphi = eA_0\varphi + c\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right)\chi \approx \left\{ \frac{\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right)^2}{2m} + eA_0 \right\} \varphi. \quad (7.51)$$

Это нерелятивистское приближение *первого порядка* для уравнения Дирака есть *уравнение Паули*, в котором верхний двухкомпонентный спинор

$\varphi$  играет роль обычной шрёдингеровской волновой функции; орбитальное гиромангнитное отношение  $g_l = e/2mc$  и спиновое гиромангнитное отношение  $g_s = 2g_l$  предсказываются этим уравнением автоматически. Из вывода ясно, что это прямое следствие спиновой структуры уравнения Дирака и минимальности включения взаимодействия с электромагнитным полем. Небольшая разница (I.1.73) между этими предсказаниями и наблюдаемым магнитным моментом электрона и мюона, *аномальные магнитные моменты*, объясняется, аналогично лэмбовскому сдвигу, *радиационными поправками* — взаимодействием с вакуумными полями. Для нуклонов аномальные магнитные моменты, см. уравнение (I.1.72), превышают обычные магнитные моменты, следующие из уравнения Паули. Причина этого в *сильных взаимодействиях*, не учитываемых в уравнении Дирака. Магнитный момент нуклона не может быть вычислен в рамках КЭД (нужно рассматривать кварковую структуру нуклонов, описываемую квантовой хромодинамикой, КХД) и должен быть включён в уравнение Дирака в качестве эмпирического параметра.

## 7.6. Эффекты второго порядка

Тонкая структура атомных спектров, в соответствии с простыми оценками гл. II.8, появляется как релятивистская поправка второго порядка  $\sim (v/c)^2$ . Для аккуратного вывода необходим выход за рамки уравнения (7.50).

Для простоты мы ограничим наше рассмотрение случаем только электрического потенциала без магнитного поля,  $\mathbf{A} = 0$ ,  $eA_0 = U(\mathbf{r})$ . Из (7.49) получаем

$$\chi = \frac{1}{2mc^2 + \varepsilon - U} c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi \approx \frac{1}{2mc} \left(1 - \frac{\varepsilon - U}{2mc^2}\right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi. \quad (7.52)$$

Исключая  $\chi$  из уравнения (7.46), находим новое уравнение для верхнего спинора

$$(\varepsilon - U)\varphi = c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi \approx \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \left(1 - \frac{\varepsilon - U}{2mc^2}\right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi. \quad (7.53)$$

Чтобы получить уравнение Шрёдингера с релятивистскими поправками, нужно учесть, что в присутствии членов второго порядка верхний спинор  $\varphi$  не может служить в качестве нерелятивистской волновой функции, поскольку он определён с другим условием нормировки. Если *биспинор*

$\Psi(\mathbf{r})$  нормирован на 1,

$$1 = \int d^3r \Psi^\dagger \Psi = \int d^3r (\varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi), \quad (7.54)$$

и нам нужны поправки не выше, чем второго порядка, то достаточно взять нижний спинор  $\chi$  в этом условии нормировки в первом порядке по  $v/c$  из уравнения (7.50). Тогда

$$1 \approx \int d^3r \left\{ \varphi^\dagger \varphi + \left( \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2mc} \varphi \right)^\dagger \left( \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2mc} \varphi \right) \right\}. \quad (7.55)$$

Используя эрмитовость оператора  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ , находим с той же точностью

$$1 = \int d^3r \varphi^\dagger \left[ 1 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2}{4m^2c^2} \right] \varphi = \int d^3r \varphi^\dagger \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2c^2} \right] \varphi, \quad (7.56)$$

где использованы свойства матриц Паули. Последнее выражение, опять с нужной точностью, может быть симметризовано по отношению к бра- и кет-спинарам

$$1 \approx \int d^3r \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi^\dagger \cdot \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi. \quad (7.57)$$

Из (7.57) видно, что новый спинор

$$\psi = \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi \quad (7.58)$$

правильно нормирован и может играть роль нерелятивистской волновой функции с точностью до второго порядка.

Для того чтобы использовать новую волновую функцию (7.58) в уравнении (7.53), вычислим следующее выражение

$$\left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] (\varepsilon - U)\psi = \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] (\varepsilon - U) \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi. \quad (7.59)$$

Пренебрегая членами четвёртого порядка, получаем

$$(\varepsilon - U)\varphi + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}(\varepsilon - U)\varphi + (\varepsilon - U)\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}\varphi. \quad (7.60)$$

Здесь первый член можно выразить с помощью уравнения (7.53), которое даёт

$$\begin{aligned} & \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] (\varepsilon - U)\psi \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\varphi + \frac{1}{8m^2c^2} \left\{ \hat{\mathbf{p}}^2(\varepsilon - U) - 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\varepsilon - U)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + (\varepsilon - U)\hat{\mathbf{p}}^2 \right\} \varphi. \end{aligned} \quad (7.61)$$

В выражении внутри скобок в (7.61) члены, содержащие  $\varepsilon$ , сокращаются, в то время как оставшиеся могут быть преобразованы к виду

$$\{...\} = \hbar^2 \nabla^2 U + 2\hbar \left( \boldsymbol{\sigma} \cdot [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \right). \quad (7.62)$$

Уравнение для правильной функции  $\psi$  может быть получено действием на обе части (7.61) оператора

$$\left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right]^{-1} \approx 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}. \quad (7.63)$$

В левой части (7.61) мы получим  $(\varepsilon - U)\psi$ , в то время как в правой части нужно умножить на оператор (7.63) только первый член, тогда как второй член уже второго порядка

$$\begin{aligned} (\varepsilon - U)\psi &= \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \psi \\ &+ \frac{1}{8m^2c^2} \left\{ \hbar^2 \nabla^2 U + 2\hbar \left( \boldsymbol{\sigma} \cdot [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \right) \right\} \psi. \end{aligned} \quad (7.64)$$

В результате мы приходим к аналогу уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi \quad (7.65)$$

с эффективным гамильтонианом второго порядка (и правильным  $ls$ -членом!)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \left( \boldsymbol{\sigma} \cdot [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \right) + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 U. \quad (7.66)$$

Физический смысл выведенных поправок и полученная картина тонкой структуры атомных спектров обсуждались в разд. II.8.3.

## 7.7. Центральное поле

Здесь мы рассмотрим уравнение Дирака для частицы в статическом внешнем поле  $U(r) = eA_0(r)$  с центральной симметрией без нерелятивистского

приближения. Однако следует помнить, что само понятие внешнего поля и соответствующее описание частицы в этом поле с помощью уравнения Дирака имеют ограниченную применимость.

При использовании внешнего поля и одночастичной формулировки *радиационными поправками*, относящимся к испусканию и поглощению виртуальных фотонов, пренебрегают. Для легких атомов, где  $v/c \sim Z\alpha \ll 1$ , наше прежнее рассмотрение по теории возмущений полностью справедливо. Виртуальные процессы дают лэмбовский сдвиг атомных уровней (разд. П.13.8) порядка  $E_b \cdot (Z\alpha)^2 \ln(1/Z\alpha)$ . Это превышает поправки  $\sim (v/c)^4$  от точного решения уравнения Дирака, которые дают вклад  $\sim E_b(Z\alpha)^4$ . Следовательно, «точное» решение уравнения Дирака обычно превышает точность, позволяющую пренебречь радиационными поправками. Тем не менее, в тяжёлых атомах, когда  $Z\alpha$  стремится к 1, радиационные поправки от виртуальных процессов играют сравнительно малую роль, и новые эффекты, возникающие в сильных полях, заслуживают обсуждения. На практике необходимо также принимать во внимание конечность размеров тяжёлых ядер, так что потенциал при этом отличается от кулоновского.

Из за присутствия спин-орбитальной связи спин и орбитальный момент не сохраняются отдельно, в то время как полный угловой момент строго сохраняется. Гамильтониан в центральном поле даётся ( $c \hbar = c = 1$ ) выражением

$$\hat{H} = \beta m + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + U(r), \quad (7.67)$$

и вектор орбитального момента  $\hat{\boldsymbol{\ell}}$  не коммутирует с импульсом  $\hat{\mathbf{p}}$

$$[\hat{\boldsymbol{\ell}}, \hat{H}] = [\hat{\boldsymbol{\ell}}, (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})] = i[\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]. \quad (7.68)$$

Результат (7.30) показывает, что сохраняющийся релятивистский оператор полного углового момента равен

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\boldsymbol{\ell}} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} \equiv \hat{\boldsymbol{\ell}} + \hat{\mathbf{s}}. \quad (7.69)$$

Как и ранее в уравнении (7.13), введём верхний  $\varphi$  и нижний  $\chi$  спиноры и запишем стационарное уравнение Дирака

$$\left( \beta m + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + U(r) \right) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (7.70)$$

как систему двух связанных дифференциальных уравнений для двух спиноров:

$$(E - m - U)\varphi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi, \quad (E + m - U)\chi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi. \quad (7.71)$$

Будем искать стационарные состояния с точными квантовыми числами  $j$  и  $j_z = m$ . Соответствующие двухкомпонентные спин-угловые функции являются сферическими спинорами  $\Omega_{\ell jm}$  (задача II.8.1). Поскольку спиноры  $\varphi$  и  $\chi$  отличаются действием псевдоскалярного оператора  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ , они должны иметь противоположную чётность. Существует только одна пара сферических спиноров с одинаковыми  $j, m$  и различной чётностью, задача II.8.3; они имеют взаимно дополнительные значения  $\ell$  и  $\ell'$  орбитального момента (II.8.29)

$$\ell + \ell' = 2j. \quad (7.72)$$

Таким образом, решение системы (7.71) имеет вид

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r)\Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}) \\ G(r)\Omega_{\ell' jm}(\mathbf{n}) \end{pmatrix}, \quad (7.73)$$

где радиальные функции  $F(r)$  и  $G(r)$  следует определить.

Сферические спиноры  $\Omega_{\ell jm}$  и  $\Omega_{\ell' jm}$  связаны через оператор  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$  (мы используем радиальный единичный вектор  $\mathbf{n}$ ). Между тем, наши уравнения (7.71) содержат оператор  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ . Используя (II.8.30), находим связь этих операторов:

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi &= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})G(r)\Omega_{\ell' jm}(\mathbf{n}) \\ &= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})G(r)\Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r})\frac{G(r)}{r}\Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}). \end{aligned} \quad (7.74)$$

Алгебра спина позволяет проделать следующее вычисление:

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}) = (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{r}) + i(\boldsymbol{\sigma} \cdot [\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}]) = -i(\operatorname{div} \mathbf{r}) - i(\mathbf{r} \cdot \nabla) - i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}). \quad (7.75)$$

Обозначая  $G' \equiv dG/dr$ ,

$$(\mathbf{r} \cdot \nabla)\frac{G(r)}{r} = r\frac{\partial}{\partial r}\frac{G(r)}{r} = G' - \frac{G}{r}, \quad (7.76)$$

и учитывая, что  $\operatorname{div} \mathbf{r} = 3$ , получаем

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi = -i\left(G' + \frac{1-\nu}{r}G\right)\Omega_{\ell jm}, \quad (7.77)$$

где введено удобное релятивистское квантовое число  $\nu$ :

$$\nu = -1 - \langle (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}) \rangle_{\ell j} = \ell(\ell + 1) - j(j + 1) - \frac{1}{4} = \begin{cases} -(\ell + 1), & j = \ell + 1/2, \\ \ell, & j = \ell - 1/2. \end{cases} \quad (7.78)$$

которое может быть коротко записано как

$$|\nu| = j + 1/2. \quad (7.79)$$

С помощью аналогичной процедуры, применённой к  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi$ , где нужно взять дополнительное значение  $\langle (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}) \rangle_{\ell j}$ , мы исключим спин-угловые переменные и придём к связанной системе двух дифференциальных радиальных уравнений

$$G' + \frac{1 - \nu}{r} G = i(E - m - U)F, \quad F' + \frac{1 + \nu}{r} F = i(E + m - U)G. \quad (7.80)$$

Эту систему можно слегка упростить стандартной подстановкой для трехмерного движения (ранее мы использовали  $R(r) = u(r)/r$ )

$$F(r) = \frac{f(r)}{r}, \quad G(r) = -i \frac{g(r)}{r}. \quad (7.81)$$

Для новых функций получаем систему

$$f' + \frac{\nu}{r} f = (E + m - U)g, \quad g' - \frac{\nu}{r} g = -(E - m - U)f. \quad (7.82)$$

### Задача 7.6

Решить уравнения (7.82) для случая свободного движения.

#### Решение.

При  $U = 0$  мы можем исключить одну из компонент, например  $g$ , и получить уравнение типа Шрёдингера

$$f'' + \left( k^2 - \frac{\nu(\nu + 1)}{r^2} \right) f = 0, \quad k = \sqrt{E^2 - m^2} \quad (7.83)$$

с заменой  $\ell \rightarrow \nu$  в центробежном члене. Общее решение является суперпозицией функций  $\sqrt{r} J_{\pm(\nu+1/2)}(kr)$ , где  $J$  — функция Бесселя. Решение, регулярное в нуле, для обоих значений  $\nu$  есть  $\sqrt{r} J_{\ell+1/2}$ . Исходные функции

$F$  и  $G$  — такие же сферические функции Бесселя, как в нерелятивистском случае, что фактически определяется геометрией пространства,

$$F(r) = N j_\ell(kr), \quad G(r) = -iN(\text{sign } \nu) \sqrt{\frac{E-m}{E+m}} j_{\ell'}(kr), \quad (7.84)$$

где  $N$  — постоянная нормировки.

### Задача 7.7

Полагая, что потенциал  $U(r)$  в (7.82) спадает достаточно быстро при  $r \rightarrow \infty$ , найти универсальный асимптотический вид решения.

#### Решение.

В асимптотике уравнения (7.82) сводятся к

$$f' \approx (E+m)g, \quad g' \approx (m-E)f. \quad (7.85)$$

Общее решение этой системы можно записать как

$$f(r) = Ae^{-\kappa r} + Be^{\kappa r}, \quad g(r) = -\sqrt{\frac{m-E}{m+E}} (Ae^{-\kappa r} - Be^{\kappa r}). \quad (7.86)$$

Здесь

$$\kappa = \sqrt{m^2 - E^2}. \quad (7.87)$$

Случай  $|E| > m$  (непрерывный спектр,  $\kappa$  мнимая,  $\pm ik$ ) соответствует задаче рассеяния, и оба слагаемых в решениях необходимы для описания расходящихся и сходящихся сферических волн. Для  $|E| < m$  (внутри энергетической щели)  $\kappa$  вещественна (для нерелятивистской задачи мы используем то же обозначение  $\kappa$ ). Физические связанные состояния с экспоненциальным спадом на больших расстояниях требуют, чтобы  $B(E) = 0$ , что определяет дискретный спектр энергий, если он существует.

## 7.8. Кулоновское поле

Точное решение уравнения Дирака может быть найдено для кулоновского поля (в наших текущих единицах  $e^2 = \alpha$ ),

$$U(r) = -\frac{Z\alpha}{r}, \quad (7.88)$$

хотя, как отмечалось выше, область его справедливости ограничена тяжёлыми атомами. Мы будем искать дискретный спектр, предполагая притяжение  $Z > 0$  и вещественное значение  $\kappa$ , уравнение (7.87).

Система уравнений, которую нужно решить, описывается выражениями (7.82):

$$f' + \frac{\nu}{r} f - \left( E + m + \frac{Z\alpha}{r} \right) g = 0, \quad g' - \frac{\nu}{r} g + \left( E - m + \frac{Z\alpha}{r} \right) f = 0. \quad (7.89)$$

Процедура решения проходит те же шаги, что и для нерелятивистского случая, разд. II.3.2. Введём безразмерную переменную расстояния

$$\rho = \kappa r, \quad (7.90)$$

найдем асимптотическое поведение  $\sim \exp(-\rho)$  и степенной закон вблизи начала координат  $\sim \rho^\gamma$ . Главные члены двух уравнений (7.89) при  $r \rightarrow 0$  определяют

$$\gamma = \sqrt{\nu^2 - (Z\alpha)^2}; \quad (7.91)$$

положительный знак корня выбран, чтобы избежать сингулярности в начале координат. Как обычно, мы должны искать полное решение в виде

$$f(\rho) = e^{-\rho} \rho^\gamma u(\rho), \quad g(\rho) = e^{-\rho} \rho^\gamma v(\rho), \quad (7.92)$$

а гладкие функции  $u(\rho)$  и  $v(\rho)$  могут быть найдены как степенные ряды:

$$u(\rho) = \sum_{k=0} u_k \rho^k, \quad v(\rho) = \sum_{k=0} v_k \rho^k. \quad (7.93)$$

### Задача 7.8

Вывести рекуррентные соотношения для коэффициентов  $u_k$  и  $v_k$  и определить дискретный спектр энергий связанных состояний. Показать, что связанным состояниям отвечают конечные полиномиальные решения.

### Решение.

Уравнения для коэффициентов с  $k = 0$  разделяются:

$$(\gamma - \nu)v_0 - Z\alpha u_0 = 0, \quad (\gamma + \nu)u_0 + Z\alpha v_0 = 0. \quad (7.94)$$

Детерминант этой системы снова определяет поведение (7.91) в начале координат. Для  $k > 0$  получим

$$\sqrt{\frac{m-E}{m+E}} u_{k-1} + Z\alpha u_k - (\gamma - \nu + k)v_k + v_{k-1} = 0, \quad (7.95)$$

$$\sqrt{\frac{m+E}{m-E}} v_{k-1} - Z\alpha v_k - (\gamma + \nu + k)u_k + u_{k-1} = 0. \quad (7.96)$$

Комбинируя уравнения (7.95) и (7.96), найдём соотношение между коэффициентами  $u_k$  и  $v_k$ :

$$u_k \left( \sqrt{\frac{m+E}{m-E}} Z\alpha + \gamma + \nu + k \right) = v_k \left( \sqrt{\frac{m+E}{m-E}} (\gamma + \nu + k) - Z\alpha \right). \quad (7.97)$$

Асимптотики рядов при  $k \rightarrow \infty$  показывают, что бесконечные ряды ведут себя при больших  $\rho$  как  $\exp(2\rho)$  с расходимостью  $\propto \exp(+\rho)$  решения (7.92). Следовательно, нам нужны полиномиальные решения, которые обрываются при конечном числе  $k = N$ , так что  $u_N$  и  $v_N$  последние ненулевые коэффициенты, в то время как  $u_{N+1} = v_{N+1} = 0$ . Если так, то из системы (7.95, 7.96) находим

$$\sqrt{m-E} u_N = -\sqrt{m+E} v_N. \quad (7.98)$$

С этим условием уравнение (7.97) с  $k = N$  даёт

$$\left( \sqrt{m-E} - \sqrt{m+E} \right) Z\alpha = 2\kappa(\gamma + N). \quad (7.99)$$

Решая это уравнение для энергии, мы приходим к дискретному спектру

$$E(N, \nu) = \frac{m}{\sqrt{1 + [Z\alpha/(N + \gamma)]^2}}, \quad (7.100)$$

где  $\nu$  входит через определение  $\gamma$ , уравнение (7.91).

Наивысшая степень  $N$  играет роль *радиального квантового числа*  $N = 1, 2, \dots$ , для двух возможных значений  $\nu$ . Особый случай возникает при  $N = 0$ . Тогда система уравнений (7.95, 7.96) сводится к

$$\frac{u_0}{v_0} = -\sqrt{\frac{m-E}{m+E}} = \frac{Z\alpha}{\gamma + \nu}. \quad (7.101)$$

Решение существует, если  $\gamma + \nu = \nu + \sqrt{\nu^2 - (Z\alpha)^2} < 0$ , т. е.  $\nu < 0$ . С учётом этого уровни могут быть пронумерованы таким образом:

$$N = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, & \nu < 0 \\ 1, 2, \dots, & \nu > 0. \end{cases} \quad (7.102)$$

Иногда  $N$  называется радиальным квантовым числом только для  $\nu < 0$ , в то время как для  $\nu > 0$  этот термин относится к  $N - 1$ .

Состояния с одинаковыми  $N$  и  $|\nu| = j + 1/2$  вырождены за исключением уровней с  $N = 0$ ; это остаток «случайного» нерелятивистского кулоновского вырождения по отношению к  $\ell$  для заданного главного квантового числа. Физическая причина отсутствия вырождения по  $\ell$  состоит в том, что орбитальный момент  $\ell$  более не сохраняется из-за спин-орбитальной связи. Может быть, более правильно здесь говорить о вырождении двух состояний с одинаковыми  $j$  и чётностью, определяемой верхним спином  $(-)^{\ell}$ .

### Задача 7.9

Найти нерелятивистский предел дираковского спектра (7.100), включающий члены второго порядка.

#### Решение.

Аналог главного квантового числа

$$n = N + |\nu| = N + j + \frac{1}{2}. \quad (7.103)$$

Разложение уравнения (7.100) по степеням  $(Z\alpha)^2$  даёт

$$E(n; \nu) \approx m - \frac{m(Z\alpha)^2}{2n^2} \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left( \frac{1}{|\nu|} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (7.104)$$

в соответствии с результатом теории возмущений (II.8.42).

Благодаря непрерывной зависимости уровней энергии от заряда  $Z$ , мы всё ещё можем характеризовать уровни энергии атома нерелятивистскими квантовыми числами, взятыми для верхнего спинора. Невырожденный уровень каждой оболочки соответствует максимальному орбитальному моменту  $\ell_{\max} = n - 1$ ,  $j = \ell_{\max} + 1/2$ ,  $\nu = -j - 1/2$ , и  $N = 0$ . Низшие

состояния таковы:

	$n$	$N$	$\nu$	$\ell$	$j$
$1s_{1/2}$	1	0	-1	0	1/2
$2s_{1/2}$	2	1	-1	0	1/2
$2p_{1/2}$	2	1	1	1	1/2
$2p_{3/2}$	2	0	-2	1	3/2
$3s_{1/2}$	3	2	-1	0	1/2
$3p_{1/2}$	3	2	1	1	1/2
$3p_{3/2}$	3	1	-2	1	3/2
$3d_{3/2}$	3	1	2	2	3/2
$3d_{5/2}$	3	0	-3	2	5/2

(7.105)

Здесь вырожденные дублеты помещены вместе и разделены горизонтальными линиями от других дублетов. Двойные линии разделяют главные оболочки. Расщепление дублетов радиационными поправками высшего порядка мало.

Детали волновых функций (выраженные в терминах гипергеометрических функций, разд. I.11.5) можно найти в [39]. Мы обсудим кратко только поведение вблизи центра, где волновые функции  $\sim \rho^{\sqrt{\nu^2 - (Z\alpha)^2} - 1}$ . Показатель степени здесь отрицателен даже при малых  $Z\alpha$ , если  $|\nu| = 1$ , т. е. для всех  $s$ - и  $p$ -уровней. Однако эта сингулярность очень слабая и не появляется вовсе, если кулоновский потенциал *регуляризован* при  $r \rightarrow 0$  конечным размером ядра. Ситуация становится более опасной при  $Z\alpha > 1$ . Решения сильно осциллируют при  $r \rightarrow 0$ , и такое нефизическое поведение показывает, что одночастичное уравнение Дирака теряет применимость, так что регуляризация необходима.

Связанные кулоновские уровни лежат внутри релятивистской энергетической щели  $E < m$ . Энергия основного состояния, в соответствии с (7.100), описывается выражением

$$E_{g.s.} = E(0; -1) = m\sqrt{1 - (Z\alpha)^2}. \quad (7.106)$$

Для заряда величиной  $Z = 1/\alpha \approx 137$  эта энергия приобретает мнимую часть, что должно интерпретироваться как распадная неустойчивость состояния, разд. I.5.8. Этого опять можно избежать регуляризацией потенциала. Тем не менее, энергия основного состояния продолжает убывать с ростом заряда  $Z$ . Существует *критический заряд*  $Z_c$ , при котором эта энергия

пересекает границу нижнего континуума

$$E_{\text{g.s.}} \rightarrow -m \quad \text{at} \quad Z \rightarrow Z_c. \quad (7.107)$$

Точная величина  $Z_c$  зависит от предположений относительно распределения заряда внутри ядра  $Z_c \approx 170$ .

Точка  $Z = Z_c$  соответствует неустойчивости дираковского вакуума. В самом деле, если существует *электронный уровень* с  $E < -m$ , вакуум неустойчив по отношению к *спонтанному образованию пар*. Электрон родившейся пары занимает этот уровень, в то время как его позитронный партнер уходит на бесконечность с нулевой кинетической энергией. В результате полная энергия системы *уменьшается* на величину  $|m + E|$  (сумма энергий партнеров). На самом деле родиться могут *две пары* вследствие двукратного спинового вырождения основного состояния, поэтому часть системы, остающаяся после перестройки, имеет заряд  $Z_c - 2$ . Эта теория [40] до настоящего времени не получила экспериментального подтверждения вследствие отсутствия стабильных ядер с зарядом порядка 170. Такие системы могут образовываться на время при столкновении тяжёлых ионов, но динамические эффекты, рождение позитронов другими конкурирующими механизмами и короткое время жизни составной системы не позволяют экспериментально наблюдать реальные эффекты вакуумной неустойчивости в критическом поле.

## 7.9. Статическое однородное магнитное поле

В этой задаче можно действовать так же, как при выводе уравнения Паули (разд. 7.5), но без разложения по степеням  $v/c$ .

Гамильтониан в этом случае содержит только векторный потенциал  $\mathbf{A}$ , который определяет магнитное поле  $\mathbf{B} = \text{curl } \mathbf{A}$ ,

$$\hat{H} = \beta m + \boldsymbol{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}). \quad (7.108)$$

Система уравнений для двухкомпонентных спиноров имеет вид

$$m\varphi + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\chi = E\varphi, \quad -m\chi + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\varphi = E\chi. \quad (7.109)$$

Отсутствие скалярного потенциала позволяет точно исключить нижний спинор  $\chi$  и получить уравнение Шрёдингера в замкнутом виде для верхнего

спинора

$$\left\{ E^2 - m^2 - \left( \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) \right)^2 \right\} \varphi = 0. \quad (7.110)$$

Как было показано в задаче II.8.6,

$$\left( \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) \right)^2 (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 - e(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}). \quad (7.111)$$

Ясно, что правильное спиновое гиромангнитное отношение появляется только после того, как минимальный принцип включения электромагнитного взаимодействия (разд. 5.10) применяется к уравнению Дирака, а не к УКГ, которому удовлетворяет любая компонента биспинора свободного движения.

### Задача 7.10

Найти энергетические уровни дираковской частицы в однородном статическом магнитном поле.

#### Решение.

Решение находится аналогично тому, что было проделано для нерелятивистской задачи, разд. I.13.5. С магнитным полем  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$  и калибровкой, выбранной как в уравнении (I.13.12),

$$\left[ E^2 - m^2 - \hat{p}_y^2 - \hat{p}_z^2 - (\hat{p}_x + e\mathcal{B}y)^2 + e\mathcal{B}\sigma_z \right] \varphi = 0. \quad (7.112)$$

Продольный импульс сохраняется:  $\hat{p}_z \varphi = p_z \varphi$ . Спинор  $\varphi$  может быть взят как собственное состояние оператора  $\sigma_z$  с собственными значениями  $\sigma = \pm 1$ . При нашей калибровке импульс  $p_x$  также сохраняется и может быть заменен константой, которая определяет  $y$ -координату центра орбиты,  $y_0 = -p_x/e\mathcal{B}$ . Тогда уравнение принимает вид

$$\left[ \hat{p}_y^2 + (e\mathcal{B})^2(y - y_0)^2 \right] \varphi = \left[ E^2 - m^2 - p_z^2 + e\sigma\mathcal{B} \right] \varphi. \quad (7.113)$$

Оператор в левой части (7.112) отвечает нерелятивистскому гармоническому осциллятору с частотой  $2|e|\mathcal{B}$ . Это определяет энергетический спектр уровней Ландау, вырожденных по  $p_x$  (или  $y_0$ ),

$$E_{n\sigma}^2(p_z) = m^2 + p_z^2 + |e|\mathcal{B}(2n + 1) - e\mathcal{B}\sigma. \quad (7.114)$$

Основной уровень Ландау,  $n = 0$  и  $\sigma = e/|e|$ , не вырожден (орбитальный и спиновый магнитные эффекты компенсируются); все другие уровни

дважды вырождены, например,  $E_{n+1,1} = E_{n,-1}$  для  $e > 0$ . Легко убедиться в правильном нерелятивистском пределе: для  $E > 0$

$$E_{n\sigma}(p_z) = m + \frac{p_z^2}{2m} + \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e}{|e|} \mu_B \sigma \mathcal{B}, \quad (7.115)$$

с  $\omega_c = |e|\mathcal{B}/m$  и  $\mu_B = |e|/2m$ . Нижний спинор  $\chi$  может быть найден в виде (7.109) и при нашей калибровке содержит матрицы Паули  $\sigma_z$  и  $\sigma_x$ . Этот недиагональный характер спиновой структуры обязан внутренней релятивистской связи между спином и орбитальным движением.

**Дополнительная литература:** [30], [32], [35], [37]



Нарушение симметрии возникает всегда, когда что-либо, что ранее считалось ненаблюдаемым, оказывается в реальности наблюдаемым. Известные примеры таких открытий — это асимметрия физических законов, возникающая при зеркальном отображении, сопряжении частиц и античастиц или обращении хода времени не из прошлого в будущее, а наоборот. Оказывается, все эти явления, казалось бы, ненаблюдаемые, фактически наблюдаемы.

*Ц. Д. Ли. «Физика частиц и введение в теорию поля»*

## Глава 8

### Дискретные симметрии, нейтрино и каоны

#### 8.1. Пространственная инверсия для дираковской частицы

Если квантовая система инвариантна относительно пространственной инверсии, то соответствующий оператор  $\hat{P}$  коммутирует с гамильтонианом, и стационарные состояния могут классифицироваться по чётности, которая является интегралом движения. Дираковский гамильтониан (6.2) свободной частицы, очевидно, был бы скаляром по отношению к инверсии, если бы матричный оператор  $\alpha$  мог рассматриваться как полярный вектор, который меняет знак при инверсии пространственных координат. Однако как и в случае вращения или преобразования Лоренца (разд. 6.5) матрицы Дирака универсальны и, следовательно, нам нужно вернуть гамильтониан к исходной форме с помощью преобразования биспинора  $\Psi$ , сравните с уравнениями (6.50) и (6.51).

Вводя  $4 \times 4$  матрицу инверсии  $\mathcal{P}$ , аналогично уравнениям (6.42) и (6.43), преобразуем биспинорную волновую функцию:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \Psi_{\mathcal{P}}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{P}\Psi(-\mathbf{r}, t). \quad (8.1)$$

В преобразованной системе координат ( $\hat{\mathbf{p}} \Rightarrow -\hat{\mathbf{p}}$ ) уравнение Дирака (6.12) принимает вид:

$$\left( i\gamma_0 \frac{\partial}{\partial t} + (\boldsymbol{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - m \right) \mathcal{P}\Psi(-\mathbf{r}, t) = 0. \quad (8.2)$$

Уравнение будет инвариантным при инверсии, если мы удовлетворим условиям

$$\mathcal{P}^{-1}\gamma_0\mathcal{P} = \gamma_0, \quad \mathcal{P}^{-1}\boldsymbol{\gamma}\mathcal{P} = -\boldsymbol{\gamma}. \quad (8.3)$$

Решение (8.3) может быть записано как

$$\mathcal{P} = \eta_{\mathcal{P}}\gamma_0, \quad (8.4)$$

где можно ввести произвольный фазовый множитель  $\eta_{\mathcal{P}}$ , равный единице по абсолютной величине.

Следовательно, верхний и нижний двухкомпонентные спиноры преобразуются *противоположным* образом

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \eta_{\mathcal{P}}\overline{\varphi}(-\mathbf{r}, t), \quad \chi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow -\eta_{\mathcal{P}}\chi(-\mathbf{r}, t). \quad (8.5)$$

Эти спиноры имеют противоположную внутреннюю чётность, как мы уже видели в явном решении, см. уравнение (7.16). Заметим, что две компоненты внутри  $\varphi$  или  $\chi$  преобразуются одинаково. Это соответствует тому факту, использовавшемуся в нерелятивистской теории, что компоненты нерелятивистского оператора спина не изменяются при инверсии (спин, как любой угловой момент, является *аксиальным вектором*).

Двойная инверсия  $\mathcal{P}^2$  может рассматриваться как тождественное преобразование или как вращение на  $2\pi$ . Для частиц со спином  $1/2$  вращение на  $2\pi$  меняет знак волновой функции (разд. II.5.1) вследствие двузначности представления группы  $SU(2)$ . Это означает, что двойная инверсия может либо вернуться к исходной волновой функции, либо поменять её знак:

$$\mathcal{P}^2 = \eta_{\mathcal{P}}^2 \gamma_0^2 = \eta_{\mathcal{P}}^2 = \pm 1. \quad (8.6)$$

Мы получили четыре возможности  $\eta_{\mathcal{P}} = \pm 1, \pm i$  и, соответственно, четыре типа частиц Дирака. Эти классы отличаются поведением при зарядовом сопряжении (разд. 6.4).

Рассмотрим действие пространственной инверсии на зарядово сопряжённую функцию (6.37), предполагая, что эта функция преобразуется *таким*

же образом, как и исходная функция

$$\mathcal{P}\Psi_C(\mathbf{r}, t) = \eta_P \gamma_0 \Psi_C(-\mathbf{r}, t) = \eta_P \gamma_0 \mathcal{C}\Psi^*(-\mathbf{r}, t). \quad (8.7)$$

Для комплексно сопряжённой функции имеем:

$$\mathcal{P}\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \eta_P^* \gamma_0^* \Psi^*(-\mathbf{r}, t), \quad (8.8)$$

поэтому

$$\mathcal{P}\Psi_C(\mathbf{r}, t) = \eta_P \gamma_0 \mathcal{C} \frac{1}{\eta_P^*} \gamma_0^* \mathcal{P}\Psi^*(\mathbf{r}, t), \quad (8.9)$$

или, используя  $\mathcal{C}\gamma_0^*\mathcal{C}^{-1} = -\gamma_0$ , как это следует из (6.38),

$$\mathcal{P}\Psi_C(\mathbf{r}, t) = -\frac{\eta_P}{\eta_P^*} \mathcal{C}\mathcal{P}\Psi^*(\mathbf{r}, t) = -\frac{\eta_P}{\eta_P^*} \mathcal{C}\mathcal{P}\mathcal{C}^{-1}\mathcal{C}\Psi^*(\mathbf{r}, t) = -\frac{\eta_P}{\eta_P^*} \mathcal{C}\mathcal{P}\mathcal{C}^{-1}\Psi_C(\mathbf{r}, t). \quad (8.10)$$

Мы приходим к следующему свойству дираковских частиц:

$$\mathcal{P} = -\frac{\eta_P}{\eta_P^*} \mathcal{C}\mathcal{P}\mathcal{C}^{-1}. \quad (8.11)$$

Два вышеупомянутых класса характеризуются различным поведением по отношению к *комбинированной инверсии*  $\mathcal{C}\mathcal{P}$ :

$$\begin{cases} \eta_P = \pm 1, & \mathcal{C}\mathcal{P} = -\mathcal{P}\mathcal{C}, \\ \eta_P = \pm i, & \mathcal{C}\mathcal{P} = \mathcal{P}\mathcal{C}. \end{cases} \quad (8.12)$$

Только вторая возможность имеет место, если трансформационные свойства биспиноров  $\Psi$  и  $\Psi_C$  идентичны. В частности, так должно быть для *нейтральных* частиц, которые тождественны своим античастицам (*частицы Майорана*) [41].

В первом случае  $\mathcal{C}\mathcal{P} = -\mathcal{P}\mathcal{C}$  частица и античастица имеют противоположную *внутреннюю чётность*: в левой части этого равенства пространственная инверсия выполняется над частицей, в то время как в правой части эта операция производится над античастицей. Это согласуется с нерелятивистским пределом уравнения Дирака в предположении, что внутренняя чётность двумерных спиноров  $\varphi$  (главная часть решения с положительной энергией) и  $\chi$  (для решения с отрицательной энергией) одна и та же. Тогда их полные чётности явно противоположны, поскольку они связаны псевдоскаляром  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})$ , уравнение (8.5).

## 8.2. Преобразование обращения времени

Обобщая нерелятивистские результаты (разд. I.8.1), будем искать *антилинейное* преобразование, которое включает перестановку начальных и конечных состояний в матричных элементах,  $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{U}_{\mathcal{T}}\Psi^*(\mathbf{r}, -t)$ , где дополнительная  $4 \times 4$  матрица  $\hat{U}_{\mathcal{T}} \equiv \mathcal{T}$  необходима, чтобы обеспечить правильность преобразования внутренних переменных, таких как спин (см. разд. II.5.8).

Ищем преобразование уравнения Дирака

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\beta m + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (8.13)$$

меняя  $t \rightarrow -t$

$$-i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = (\beta m + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Psi(\mathbf{r}, -t) \quad (8.14)$$

и осуществляя комплексное сопряжение, получаем:

$$i \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = (\beta^* m - \boldsymbol{\alpha}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Psi^*(\mathbf{r}, -t), \quad (8.15)$$

с учетом того, что  $\hat{\mathbf{p}}^* = -\hat{\mathbf{p}}$ . Действуя затем унитарным оператором  $\mathcal{T}$  на биспинорные компоненты волновой функции, получим

$$i \frac{\partial \mathcal{T}\Psi^*(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = (\mathcal{T}\beta^*\mathcal{T}^{-1}m - \mathcal{T}\boldsymbol{\alpha}^*\mathcal{T}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \mathcal{T}\Psi^*(\mathbf{r}, -t). \quad (8.16)$$

Таким образом, функция

$$\Psi_{\mathcal{T}}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{T}\Psi^*(\mathbf{r}, -t) \quad (8.17)$$

удовлетворяет тому же уравнению Дирака, что требуется для инвариантности, если матрицы Дирака преобразуются согласно

$$\mathcal{T}\beta^*\mathcal{T}^{-1} = \beta, \quad \mathcal{T}\boldsymbol{\alpha}^*\mathcal{T}^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}. \quad (8.18)$$

Почувительно сравнить это с зарядовым сопряжением (6.38), результат действия которого имеет противоположный знак.

### Задача 8.1

Показать, что в стандартном представлении (6.7) мы можем положить

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^\dagger = \mathcal{T}^{-1} = i\gamma_1\gamma_3. \quad (8.19)$$

Легко видеть, что в присутствии электромагнитного поля  $(\varphi, \mathbf{A})$  инвариантность по отношению к обращению времени имеет место, только если вдобавок к преобразованию волновой функции (8.17) и матриц Дирака (8.18) векторный потенциал меняет знак  $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ , в то время как  $\varphi$  не меняется. Это объясняется природой векторного потенциала, создаваемого *электрическими токами*, которые должны менять знак при обращении времени. Произвольный фазовый множитель  $\eta_T$  с абсолютным значением 1 может также присутствовать в определении (8.19).

### 8.3. $\mathcal{CPT}$ -преобразование

Квантовая теория поля утверждает [29], что в любой теории с локальными взаимодействиями, которая релятивистски инвариантна и сохраняет вероятность (унитарность динамики (гл. 1)), имеет место инвариантность по отношению к произведению  $\mathcal{CPT}$  трёх дискретных преобразований, обращения времени  $\mathcal{T}$ , пространственной инверсии  $\mathcal{P}$  и зарядового сопряжения  $\mathcal{C}$ . Для свободного уравнения Дирака это означает, что после перемножения преобразований (6.40), (8.4) и (8.19)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow -i\eta_P \gamma_5 \Psi(-\mathbf{r}, -t), \quad (8.20)$$

где матрица  $\gamma_5$  была определена в уравнении (6.16), и мы положили фазовые множители для  $\mathcal{C}$ - и  $\mathcal{T}$ -преобразований равными единице.

По существу полное  $\mathcal{CPT}$ -преобразование сводится к *четырёхмерной инверсии* координат и времени, дополненной заменой всех частиц на античастицы, что может быть заметно только при взаимодействии с полем, например электромагнитным, которое различает частицы и античастицы. Этот результат согласуется со старой идеей, что античастицы могут рассматриваться как *частицы, движущиеся обратно во времени*. Поскольку импульс  $\mathbf{p}$  и спин  $\mathbf{s}$  частицы переходят при 4-инверсии в  $\mathbf{p}$  (пространственное отражение компенсируется отражением времени) и  $-\mathbf{s}$  (обращение времени),  $\mathcal{CPT}$ -инвариантность предсказывает одинаковые вероятности таких двух процессов:

$$\mathbf{p}, \mathbf{s} \Rightarrow \mathbf{p}', \mathbf{s}' \text{ (частица)} \quad (8.21)$$

и его  $\mathcal{CPT}$ -образа

$$\mathbf{p}, -\mathbf{s} \Rightarrow \mathbf{p}', -\mathbf{s}' \text{ (античастица)}. \quad (8.22)$$

Универсальность  $СРТ$ -инвариантности во всех принятых ныне теориях позволяет судить об инвариантности по отношению к отдельным дискретным преобразованиям по результатам экспериментов, в которых проверялась дополнительная инвариантность. Например, отсутствие инвариантности при *комбинированной инверсии*  $СР$  может рассматриваться как доказательство нарушения инвариантности по отношению к обращению времени  $T$ .

#### 8.4. Безмассовые частицы

Рассмотрим предельный случай уравнения Дирака для частицы с  $m = 0$ . Такая частица движется в любой системе координат со скоростью света. Приближённо это уравнение используется также для описания любого *ультрарелятивистского* движения с  $E \gg m$ . В согласии с этим, из уравнения Дирака получаем (7.7) спектр энергий ( $c = 1$ )

$$E = \pm |\mathbf{p}| \equiv \pm p. \quad (8.23)$$

Удобно ввести единичный вектор

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{E} = \frac{\mathbf{p}}{p} \text{sign } E. \quad (8.24)$$

Тогда двухкомпонентные безмассовые спиноры (7.15) удовлетворяют простым уравнениям

$$\varphi = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E} \chi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\chi, \quad \chi = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E} \varphi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\varphi. \quad (8.25)$$

Оператор  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$  совпадает со спиральностью  $h$  для положительной энергии и с  $-h$  для отрицательной энергии.

Можно перейти к линейным комбинациям спиноров  $\varphi$  и  $\chi$

$$\psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi \pm \chi). \quad (8.26)$$

Они подчиняются *несвязанным уравнениям Вейля*

$$\psi^{(\pm)} = \pm (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\psi^{(\pm)}. \quad (8.27)$$

В противоположность нерелятивистскому пределу, когда компоненты нижнего спинора малы, в ультрарелятивистском пределе, когда можно пре-

небрежь массой, оба спинора входят в уравнение (8.26) с равным весом. Новые спиноры  $\psi^{(\pm)}$  имеют определённую *спиральность*, соответствующие частицы продольно поляризованы. Для такой частицы не нужно четырех компонент, они полностью описываются двухкомпонентными спинорами. В самом деле, у дираковских частиц при *свободном движении* сохраняется спиральность, задача 7.4. Следовательно, квантовые состояния, описываемые спинорами  $\psi^{(\pm)}$ , сохраняют свою индивидуальность без смешивания с партнерами. Это означает, что мы можем использовать простое двухкомпонентное описание вместо полного уравнения Дирака. Смешивание  $\psi^{(+)}$  и  $\psi^{(-)}$  возможно только за счёт внешних полей или за счёт взаимодействия с другими частицами.

Важно, что продольная поляризация безмассовой частицы является *релятивистским инвариантом*. Для  $m \neq 0$  можно найти систему отсчёта, движущуюся быстрее частицы. В этой системе спиральность частицы будет иметь противоположный знак. Но для  $m = 0$  такой системы не существует. Следовательно, должно быть возможным нахождение явно инвариантного определения спиральности безмассовых частиц. Это можно сделать с помощью оператора  $\gamma_5$ , уравнение (6.16). Мы определим проекционный оператор *киральности* как

$$\Lambda^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \mp \gamma_5). \quad (8.28)$$

Используя стандартное представление (6.17) матрицы  $\gamma_5$  и действуя на произвольный биспинор (7.13), получим

$$\Lambda^{(\pm)} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \varphi \pm \chi \\ \pm \varphi + \chi \end{pmatrix}, \quad (8.29)$$

или, в терминах спиноров Вейля (8.26),

$$\Lambda^{(\pm)} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^{(\pm)} \\ \pm \psi^{(\pm)} \end{pmatrix}. \quad (8.30)$$

Проекционный оператор киральности сводит биспинор к двухкомпонентному спинору определённой *киральности*. Тот же результат для безмассовой частицы, в силу (8.27), может быть достигнут с помощью оператора спиральности:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( (1 \pm (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n})) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \pm (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) & 0 \\ 0 & 1 \pm (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^{(\pm)} \\ \pm \psi^{(\pm)} \end{pmatrix}. \quad (8.31)$$

Таким образом, для безмассовых частиц спиральность и киральность эквивалентны

$$(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}) = -\gamma_5. \quad (8.32)$$

Это означает, что здесь спиральность является Лоренц-инвариантным псевдоскаляром.

## 8.5. Нейтрино в безмассовом пределе

Долгое время считалось, что нейтрино не имеют массы. Теперь вполне определенно можно утверждать, что масса нейтрино конечна, хотя, вероятно, очень мала даже по сравнению с массой электрона, который является легчайшей среди известных частиц; единственной точно безмассовой частицей является фотон (и сюда может быть добавлен гравитон после обнаружения гравитационных волн). Из-за малой массы все же имеет смысл представить мир безмассовых нейтрино. Прямое измерение масс нейтрино весьма затруднительно, до сих пор мы имеем только верхние границы масс.

Сейчас мы знаем три типа (*поколений*), или *ароматов* нейтрино, связанных с тремя поколениями заряженных *лептонов*, — электрон, мюон и  $\tau$ -лептон. Соответствующие нейтрино и антинейтрино образуются в *слабых взаимодействиях* вместе с их напарниками — заряженными лептонами. Слабые взаимодействия генерируются *левыми токами*. Это означает, что волновая функция рождённого или взаимодействующего нейтрино в матричном элементе взаимодействия умножена на проекционный оператор левой киральности  $\Lambda^{(+)}$ . В пределе  $m \rightarrow 0$  эта левая спиральность инвариантна, и тогда мы имеем только левополяризованное нейтрино со спином антипараллельным импульсу. Частицы  $\bar{\nu}_e$ , образуемые вместе с электроном в обычном  $\beta$ -распаде нейтрона

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \quad (8.33)$$

или в аналогичном  $\beta^-$ -распаде сложных ядер, называются *электронными антинейтрино*. Эта терминология относится к предполагаемому сохранению *лептонного заряда*, когда электрону приписывается лептонный заряд +1, а его нейтринный партнер должен иметь противоположный лептонный заряд -1. Частица, образуемая вместе с позитроном в ядерном  $\beta^+$ -распаде

ядра  $A$  с  $Z$  протонами и  $N = A - Z$  нейтронами,

$${}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z-1)_{N+1} + e^+ + \nu_e, \quad (8.34)$$

является электронным нейтрино с лептонным зарядом  $+1$ . Эксперименты показывают, что антинейтрино в таких процессах (8.33) правополяризованы, в противоположность нейтрино. Сопоставляя частицу нейтрино с решением  $E > 0$ , а антинейтрино с античастицей, мы видим, что в обоих случаях  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = -1$ , поэтому в безмассовом пределе нейтрино, связанные со слабым взаимодействием, описываются уравнениями Вейля (8.27) с нижним знаком. Другая возможность могла бы иметь место при взаимодействиях, управляемых *правыми токами*, но такие взаимодействия не наблюдались.

Таким образом, стационарные волновые функции безмассовых нейтрино характеризуются *псевдоскалярным* квантовым числом — спиральностью. При пространственной инверсии спиральность меняет знак, поэтому мы не получим ту же самую функцию с знаком  $+$  или  $-$ , как это было бы в случае состояния с определённой чётностью; вместо этого мы придём к *отличному* от него состоянию. Существование частицы с продольной поляризацией, аналогично круговой поляризации фотона, само по себе не указывает на несохранение чётности. В случае фотонов сохранение чётности восстанавливается существованием фотонов с противоположной круговой поляризацией, но с той же энергией. В случае нейтрино этот аргумент не работает, потому что безмассовое нейтрино всегда левополяризовано и не существует с правой поляризацией. Делая пространственную инверсию и обращая спиральность нейтрино, мы приходим к несуществующему (в безмассовом случае) правому нейтрино. Это означает *максимальное несохранение чётности*. Эксперимент показывает, что в сильном и электромагнитном взаимодействиях чётность сохраняется. Безмассовое нейтрино не принимает участия в этих взаимодействиях, в то время как в слабых взаимодействиях, где нейтрино является активным участником, чётность не сохраняется. Структура слабых взаимодействий только с левыми токами оказывается такой, что смешивания нейтрино и антинейтрино гарантированно не происходит.

Продольная поляризация безмассового нейтрино означает в то же время нарушение инвариантности по отношению к зарядовому сопряжению. Таким же образом, как нарушение инвариантности по отношению к пространственной инверсии  $\mathcal{P}$  выявлялось в преобразовании левого нейтрино в несуществующее правое нейтрино, при операции  $\mathcal{C}$ , хотя спиральность не

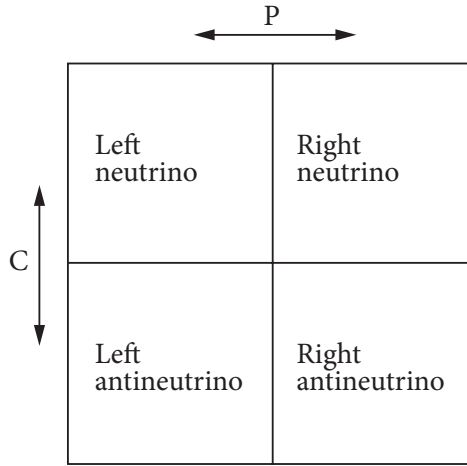


Рис. 8.1. Схема зарядового сопряжения и пространственной инверсии для нейтрино и антинейтрино

меняется, но левовинтовое нейтрино переходит в несуществующее левовинтовое антинейтрино (рис. 8.1).

Однако можно видеть, что при *комбинированном преобразовании  $CP$*  мы преобразуем левое нейтрино в правое антинейтрино, описываемое *тем же* уравнением Вейля (8.27) с нижним знаком. При отсутствии  $C$ - и  $P$ -инвариантности по отдельности природа в этом пределе, кажется, остается инвариантной при *комбинированной инверсии  $CP$* . В соответствии с гипотезой *Л.Д. Ландау (1956)* сохранение комбинированной чётности замещает нарушение инвариантности по отношению к пространственной инверсии и зарядовому сопряжению по отдельности. Впервые небольшое нарушение  $CP$ -инвариантности наблюдалось [42] при распаде долгоживущей компоненты нейтральных каонов на два пиона; физика нейтральных каонов будет кратко обсуждаться ниже. Эффекты  $CP$ -нарушения наблюдались также для нейтральных  $B$ -мезонов [43]. Вследствие  $CPT$ -теоремы, эти результаты говорят о нарушении инвариантности относительно обращения времени. И наоборот, экспериментальное открытие  $T$ -нарушающих корреляций, например, появление  $T$ -нечётных членов, таких как  $\mathbf{s}_n \cdot [\mathbf{p}_e \times \mathbf{p}_\nu]$ , в вероятности  $\beta$ -распада (8.33) поляризованных нейтронов может быть подтверждением  $CP$ -нарушения. Эта зависимость от угла между плоскостью движения электрон-нейтрино и исходной поляризацией нейтрона меняет знак при обращении времени.

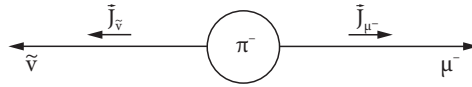


Рис. 8.2. Вынужденная поляризация в распаде пиона

## 8.6. Ещё о несохранении чётности

Мы ввели концепцию нарушения чётности в разд. I.8.5. Практически это несохранение обнаружено во всех процессах с участием слабых взаимодействий безотносительно к присутствию или отсутствию нейтрино.

В течение долгого времени так называемый  $\theta$ -распад положительно заряженных каонов на положительный и нейтральный пион



оставался загадкой. *Псевдоскалярные мезоны*, такие как пионы и каоны, имеют нулевой спин  $J$  и отрицательную внутреннюю чётность  $\Pi$ . Их квантовые числа спин-чётность могут быть записаны как  $J^\Pi = 0^-$ , так же как для псевдоскалярного оператора (источник термина «псевдоскалярные мезоны»). Мы можем рассматривать процесс (8.35) в системе покоя  $K^+$ . Чётность  $\Pi_i$  начальной волновой функции определяется каоном  $\Pi_i = \Pi_K = -1$ . В конечном состоянии мы имеем два пиона, поэтому их комбинированная внутренняя чётность положительна, а полная чётность конечного состояния есть  $(-)^{\ell}$ , где  $\ell$  — орбитальный момент относительного движения пионов. Но спины всех трёх частиц равны нулю, и сохранение углового момента требует  $\ell = J_K = 0$ . Тогда  $\Pi_f = (-)^{\ell} = +1 = -\Pi_i$ . Поскольку  $\theta$ -распад, который был бы запрещён при сохранении чётности, составляет более 20 % всех распадов  $K^+$ , то чётность нарушается в слабых взаимодействиях.

Как отмечалось в разд. I.8.5, псевдоскалярные корреляции, такие, как скалярное произведение  $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{J})$  полярного вектора, например, импульса  $\mathbf{p}$  и аксиального вектора, например, углового момента или спина  $\mathbf{J}$ , характерны для несохранения чётности. Подобный эффект наблюдается в *вынужденной поляризации* мюонов или электронов (свойства заряженных лептонов,  $e$ ,  $\mu$ , и  $\tau$ , аналогичны, за исключением разных масс) в пионных распадах

$$\pi^+ \rightarrow \begin{cases} \mu^+ + \nu_\mu \\ e^+ + \nu_e \end{cases}; \quad \pi^- \rightarrow \begin{cases} \mu^- + \bar{\nu}_\mu \\ e^- + \bar{\nu}_e \end{cases} \quad (8.36)$$

Рассмотрим снова такой процесс в системе покоя распадающегося пиона с квантовыми числами  $J^{\Pi} = 0^{-}$  (рис. 8.2). Здесь для нашего обсуждения удобно использовать плосковолновой базис. Конечные частицы, движущиеся в противоположные стороны, в этой системе должны иметь нулевую проекцию полного спина на направление движения (проекция орбитального момента на направление  $\mathbf{p}$  исчезает). Тогда спины конечного нейтрино (антинейтрино) и позитрона (электрона) или положительного (отрицательного) мюона противоположны. Но безмассовые нейтрино или антинейтрино всегда поляризованы. Это автоматически фиксирует спиральность заряженного лептона. Например, отрицательный мюон или электрон *обязательно*, в силу законов сохранения, правополяризован в  $\pi^{-}$ -распаде, в то время как положительный мюон или позитрон *обязательно* левополяризованы в  $\pi^{+}$ -распаде.

С другой стороны, если дираковская частица с  $m \neq 0$  имеет большую энергию  $E \gg m$ , то в волновой функции можно пренебречь массой. Структура слабого взаимодействия (левые токи) универсальна для всех лептонов; в ультрарелятивистском пределе они будут вести себя как нейтрино, а античастицы как антинейтрино во всех процессах, за которые ответственно слабое взаимодействие. Поэтому существует *естественная поляризация* ультрарелятивистских лептонов: частицы левополяризованы, а античастицы правополяризованы. Таким образом, в так называемых  $K_{e3}$  и  $K_{\mu 3}$  распадах

$$K^{+} \rightarrow \pi^{0} + \begin{cases} e^{+} + \nu_e \\ \mu^{+} + \nu_{\mu} \end{cases} \quad (8.37)$$

в большинстве случаев положительные лептоны  $e^{+}$  и  $\mu^{+}$  будут иметь естественную (правую) поляризацию. Здесь нет строгой корреляции спиральностей, как это было в двухчастичных распадах (8.36). Однако в тех редких случаях, когда нейтральный пион в распадах (8.37) очень медленный и несёт малый импульс в системе покоя распадающейся частицы, импульсы заряженных лептонов снова антикоррелируют с импульсами нейтрино. Как в двухчастичных распадах, мы получим корреляцию спиральностей: полный спин должен исчезать, чтобы обеспечить сохранение углового момента ( $J_K = J_{\pi} = 0$ ). В таких случаях заряженные лептоны обладают кинематически навязанной поляризацией, противоположной естественной. Для безмассовых позитронов, или  $\mu^{+}$ , такие случаи должны быть строго запрещены. Поскольку  $m_e \ll m_{\mu}$ , электронные распады пионов (8.36) подавлены этим несоответствием поляризаций гораздо сильнее, чем мюонные распады. В результате доля (*бранчинг*) электронных распадов

порядка  $10^{-4}$ , несмотря на то что из-за близких масс  $m_\pi$  и  $m_\mu$  доступный в мюонном распаде фазовый объем (разд. II.11.3) значительно меньше, чем в электронном распаде.

### Задача 8.2

Рассмотреть распад положительного поляризованного мюона

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu \quad (8.38)$$

и показать, что наиболее энергичные позитроны движутся вдоль спина исходного мюона.

### Решение.

Энергия позитрона максимальна, если электронное нейтрино и мюонное антинейтрино движутся вместе в направлении, противоположном движению позитрона. В этом случае сумма их спиральностей исчезает, и спин позитрона должен быть направлен вдоль исходного спина  $\mu^+$ . Но в слабых распадах быстрый позитрон имеет естественную поляризацию античастицы (правовинтовую), т. е. его спин и импульс параллельны. При зарядово сопряжённом распаде

$$\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e \quad (8.39)$$

максимум углового распределения наиболее энергичных электронов направлен противоположно спину  $\mu^-$ .

## 8.7. Осцилляции нейтрино

Термоядерные реакции на Солнце включают процессы, управляемые слабым взаимодействием, и генерируют значительное количество электронных нейтрино. Принятые солнечные модели предсказывают поток нейтрино на Землю, приблизительно равный  $6,6 \times 10^{10}$  электронных нейтрино на  $\text{см}^2$  в секунду. Дефицит нейтрино при наблюдениях почти определённо указывает, что нейтрино имеют ненулевую массу и *осциллируют* между различными типами (ароматами). Высокоэнергичные нейтрино, которые образуются в мюонном распаде в атмосфере (мюон является продуктом пионного распада (8.36), в то время как пионы генерируются первичными компонентами космических лучей, например протонами, при их столкновении с ядрами в атмосфере) могут также осциллировать.

Осцилляции возникают в результате несоответствия между состоянием нейтрино, образованным в процессе, подобном  $\beta$ -распаду, и собственными

состояниями гамильтониана нейтрино. Обычный  $\beta$ -распад создает заряженные лептоны и соответствующие им нейтрино с тем же самым ароматом  $f$  ( $e$ ,  $\mu$  или  $\tau$ ). Однако собственные состояния гамильтониана  $\nu_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ , которые имеют определенные массы  $m_\alpha$ , являются комбинациями различных ароматов. Преобразование из представления аромата в собственные состояния масс задается унитарной матрицей  $U$  размерностью, определяемой числом смешивающихся ароматов

$$|\nu_f\rangle = \sum_{\alpha} U_{f\alpha} |\nu_\alpha\rangle. \quad (8.40)$$

Мы уже упоминали такую возможность выше в задаче П.11.3. Поэтому начальное состояние после  $\beta$ -распада *нестационарно*, что порождает следующие осцилляции.

Мы рассмотрим простейшую модель квантовых осцилляций, предполагая, что они имеют место только между двух ароматов, например для электронного и мюонного нейтрино. Предположим, что начальная энергия  $E$ , высвобождаемая в процессе, распределена между двумя частицами, одна из которых — нейтрино в состоянии с определенным ароматом. Например, пионный распад порождает мюон и мюонное нейтрино  $\nu_\mu$ , что описывается волновой функцией, содержащей две стационарные компоненты  $\nu_1$  и  $\nu_2$ . Если *угол смешивания* обозначить  $\vartheta$ , то

$$|\nu_\mu\rangle = \cos \vartheta |\nu_1\rangle + \sin \vartheta |\nu_2\rangle, \quad (8.41)$$

в то время как состояние с дополнительным ароматом, например, электронного нейтрино, ортогонально

$$|\nu_e\rangle = \cos \vartheta |\nu_2\rangle - \sin \vartheta |\nu_1\rangle. \quad (8.42)$$

Начальная волновая функция мюонного нейтрино, порождённого слабым взаимодействием, в соответствии с (8.41) равна

$$\Psi(x, t = 0) = \cos \vartheta e^{ip_1x} |\nu_1\rangle + \sin \vartheta e^{ip_2x} |\nu_2\rangle. \quad (8.43)$$

Временная эволюция этого нестационарного состояния соответствует двум стационарным компонентам с энергией  $E_{1,2} = \sqrt{m_{1,2}^2 + p_{1,2}^2}$ :

$$|\Psi(x, t)\rangle = \cos \vartheta e^{i(p_1x - E_1t)} |\nu_1\rangle + \sin \vartheta e^{i(p_2x - E_2t)} |\nu_2\rangle. \quad (8.44)$$

Для детектирования определенного типа нейтрино нам нужно использовать слабое взаимодействие с мишенью. Это взаимодействие различает между электронным и мюонным нейтрино, так что мы опять должны выразить результат (8.44) в терминах состояний с определенным ароматом:

$$|\nu_1\rangle = \cos \vartheta |\nu_\mu\rangle - \sin \vartheta |\nu_e\rangle, \quad |\nu_2\rangle = \cos \vartheta |\nu_e\rangle + \sin \vartheta |\nu_\mu\rangle. \quad (8.45)$$

Волновая функция (8.44) в момент времени  $t$  превращается в

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)\rangle = & |\nu_\mu\rangle \left( \cos^2 \vartheta e^{i(p_1 x - E_1 t)} + \sin^2 \vartheta e^{i(p_2 x - E_2 t)} \right) \\ & + |\nu_e\rangle \cos \vartheta \sin \vartheta \left( e^{i(p_2 x - E_2 t)} - e^{i(p_1 x - E_1 t)} \right). \end{aligned} \quad (8.46)$$

Предположим, что наш детектор в точке  $x$  регистрирует только электронные нейтрино путём подсчета числа электронов, образуемых в результате реакции детектирования. Тогда скорость счёта — прямое доказательство преобразования исходных мюонных нейтрино пропорциональна

$$I_e(x, t) = |\langle \nu_e | \Psi(x, t) \rangle|^2 = \cos^2 \vartheta \sin^2 \vartheta |e^{i(p_2 x - E_2 t)} - e^{i(p_1 x - E_1 t)}|^2. \quad (8.47)$$

Таким образом, зарегистрированная интенсивность осциллирует как функция времени и координат детектора:

$$I_e(x, t) = \frac{1}{2} \sin^2(2\vartheta) [1 - \cos \varphi(x, t)], \quad (8.48)$$

где фаза осцилляции

$$\varphi(x, t) = (p_1 - p_2)x - (E_1 - E_2)t. \quad (8.49)$$

Поскольку масса нейтрино в любом случае очень мала, и они движутся с околосветовой скоростью, мы можем положить  $x \approx t$  (в единицах  $c = 1$ ) и разложить энергии по малому параметру (отношению массы к импульсу)

$$E = \sqrt{p^2 + m^2} \approx p + \frac{m^2}{2p}, \quad (8.50)$$

что приводит к

$$\varphi(x) \approx \left( \frac{m_2^2}{2p_2} - \frac{m_1^2}{2p_1} \right) x \approx \frac{m_2^2 - m_1^2}{2p} x \equiv \frac{\Delta(m^2)}{2p} x, \quad (8.51)$$

где мы можем приближенно положить  $p_1 = p_2 = p$ . Таким образом, осцилляции (8.48) описываются выражением

$$\cos \varphi(x) = \cos \left( \frac{2\pi x}{L} \right), \quad (8.52)$$

где *длина осцилляции*

$$L = \frac{4\pi p}{\Delta(m^2)}. \quad (8.53)$$

Амплитуда осцилляции (8.48) зависит от угла смешивания  $\vartheta$ . Если этот угол близок к максимуму,  $\vartheta \approx 45^\circ$ , эксперимент позволяет определить  $\Delta(m^2)$ , а не сами массы. Для очень большого  $\Delta(m^2)$  длина  $L$  может стать слишком малой, и осцилляции в детекторе усредняются. Текущее ограничение  $\Delta(m^2) \leq 1 \text{ эВ}^2$  соответствует достаточно большой длине осцилляций.

## 8.8. Нейтрино Майорана

Отличие массы нейтрино от нуля, которое следует из результатов солнечных и земных экспериментов [44], [45], заставляет вернуться к вопросу о характере этой массы. Мы упоминали, что нейтрино, рождённые в слабых взаимодействиях, таких как бета-распад, левополяризованы. Такое утверждение может быть точным только для безмассовых нейтрино, и это заложено в Стандартной модели элементарных частиц, где мы можем использовать двухкомпонентные нейтрино Вейля. Проблема массы нейтрино существенно связана с поисками физики за рамками Стандартной модели.

Мы обсуждали  $\mathcal{CP}$ -симметрию между левым нейтрино и правым антинейтрино в пределе нулевых масс (см. рис. 8.1). Различие между нейтрино и антинейтрино традиционно основано на знаменитом эксперименте *P. Дэвиса 1955г.* [46]. Если мы назовем «*антинейтрино*» частицу  $\bar{\nu}_e$ , полученную в обычном бета-распаде (8.33) вместе с электроном, эта частица, как показано экспериментально, не может индуцировать обратную реакцию типа

$$\bar{\nu}_e + {}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z+1)_{N+1} + e^-. \quad (8.54)$$

Из отсутствия такого процесса можно заключить, что нейтрино (испущенное в бета-распаде позитрона) и антинейтрино из электронного бета-распада являются различными частицами, как на рис. 8.1. Это можно формально приписать сохранению электронного *лептонного заряда*  $L_e$ , полагая, что этот заряд равен  $+1$  для частиц ( $e^-, \nu_e$ ) и  $-1$  для античастиц ( $e^+, \bar{\nu}_e$ ). Реакция (8.54) нарушала бы  $L_e$  на две единицы.

Аналогичное заключение следовало из отсутствия *безнейтринного двойного бета-распада*. Имеются случаи, когда обычный бета-распад нестабильных ядер энергетически запрещён, но двойной бета-распад, соответствующий схеме

$${}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z-2)_{N+2} + 2e^+ + 2\bar{\nu}_e, \quad (8.55)$$

наблюдается, в то время как безнейтринный распад

$${}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z-2)_{N+2} + 2e^+ \quad (8.56)$$

до сих пор не был надёжно установлен. В качестве механизма для такого процесса можно представить два акта нормального бета-распада с виртуальным антинейтрино, испущенным на первом шаге и затем поглощённым во втором акте, как в (8.54). Безнейтринный процесс может быть экспериментально идентифицирован по фиксированной полной энергии двух испущенных электронов.

«Однако теперь мы знаем, что ситуация не столь ясна, как аргументировано выше» [47]. Если слабое взаимодействие основано на левых токах, антинейтрино из бета-распада, будучи правополяризованным, не может индуцировать реакцию (8.54); аналогично требования спиральности не допускают безнейтринный двойной бета-распад для частиц на рис. 8.1 даже без требования сохранения лептонного заряда. Тем не менее, эти заключения строго справедливы только для дираковских безмассовых частиц, которые можно описывать двухкомпонентными спинорами Вейля. Как мы теперь знаем, нейтрино не являются безмассовыми, спиральность перестаёт быть релятивистским инвариантом, и возможность иметь нейтрино и антинейтрино тождественными частицами должна быть рассмотрена снова. В этом случае они должны быть частицами *Майорана*. Поиск безнейтринного двойного бета-распада продолжается.

Определим киральные левый  $\Psi_L$  и правый  $\Psi_R$  биспиноры с помощью проекционных операторов киральности (8.28), действующих на произвольное состояние  $\Psi$ ,

$$\Psi_L = \frac{1 - \gamma_5}{2} \Psi, \quad \Psi_R = \frac{1 + \gamma_5}{2} \Psi, \quad \Psi = \Psi_L + \Psi_R. \quad (8.57)$$

Для уравнения Дирака у нас есть лоренц-инвариантный скалярный массовый член (6.84)

$$M_D = m\bar{\Psi}\Psi \quad (8.58)$$

и, поскольку матрица  $\gamma_5$  антикоммутирует с  $\gamma_0$  в определении сопряжённого по Дираку биспинора  $\bar{\Psi}$  (задача 6.1), мы можем переписать (8.58) как

$$M_D = m \left( \bar{\Psi}_L \Psi_R + \bar{\Psi}_R \Psi_L \right). \quad (8.59)$$

Дираковский массовый член проявляется в динамике, связывая состояния различной киральности. Только безмассовая частица может сохранять свою киральность.

Другая возможность, *нейтрино Майорана*, появляется, если частицы и античастицы, описываемые зарядово-сопряжёнными состояниями  $\Psi_C$  (6.37, 6.40), *тождественны*. Конечно, это возможно только для действительно нейтральных частиц — иначе их заряды должны быть противоположными. Лептонный заряд нейтрино здесь теряет смысл. Формально говоря, дополнительная матрица  $\gamma_2$ , которая выполняет, в соответствии с уравнением (6.40), зарядовое сопряжение, восстанавливает правильную киральность в лоренцевском скаляре. Тогда массовые члены для левой киральности могут иметь вид:

$$M_M = \frac{m_L}{2} \left\{ (\bar{\Psi}_L)_C \Psi_L + \text{H.c.} \right\}, \quad (8.60)$$

и аналогичные члены с массой  $m_R$  возможны для состояний правой киральности. Массовые члены этой структуры описывают переход частицы в её зарядово сопряжённую античастицу. Тогда механизм безнейтринного двойного бета-распада становится возможным. Даже если безнейтринный двойной бета-распад происходит с помощью другого механизма, без промежуточного нейтрино эквивалентного антинейтрино, эта частица должна быть майорановской природы, поскольку такой процесс может сам быть виртуальной стадией, ведущей к превращению нейтрино в антинейтрино [48]. В принципе даже наличие обоих типов масс, Дирака и Майорана, не запрещено. Только эксперименты могут решить эту проблему, что также весьма важно для астрофизики и космологии [45].

## 8.9. Странность

Нейтральные  $K$ -мезоны — *каоны* образуются в столкновениях сильновзаимодействующих частиц — *адронов* в совокупности с другими нестабильными частицами, *гиперонами* — более тяжёлыми аналогами нуклонов. Типичная реакция может быть следующей: нейтральный каон  $K^0$  рождается вместе

с  $\Lambda$ -гипероном в столкновении пиона  $\pi^-$  с протоном,



Для всех этих нестабильных частиц ( $\pi, K, \Lambda, \dots$ ) общим свойством является время жизни порядка  $10^{-(8 \div 10)}$  с, долгое по сравнению с  $10^{-23}$  с — характерным временем пролёта через расстояние порядка радиуса действия ядерных сил  $\sim 1$  фм  $= 10^{-13}$  см. Медленный распад показывает, что слабое, а не сильное (ядерное) взаимодействие ответственно за этот процесс, так же как для бета-распада (8.33). В то же время вероятность реакций рождения типа (8.61) велика, что, безусловно, указывает на сильное взаимодействие. Можно заключить, что энергетически разрешённые быстрые распады каонов и гиперонов, такие как  $\Lambda^0 \rightarrow p + \pi^-$ , запрещены для ядерных сил новым законом сохранения, который справедлив для сильных взаимодействий, но может нарушаться в слабых процессах. Такая гипотеза (*М. Гелл-Манн, К. Нишиджима, 1955*) приписывает адронам новое аддитивное квантовое число — *странность*. Странность  $S$  равна нулю для «обычных» адронов (нуклоны и пионы), но отлична от нуля для *странных частиц*, гиперонов и каонов. Весь арсенал разнообразных экспериментальных данных согласуется с тем, что странность может быть приписана частицам следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{мезоны:} \quad & K^+, K^0 \Rightarrow S = +1; \quad K^-, \bar{K}^0 \Rightarrow S = -1; \\ \text{гипероны:} \quad & \Lambda^0, \Sigma^{+,0,-} \Rightarrow S = -1; \\ & \Xi^{-,0} \Rightarrow S = -2, \quad \Omega^- \Rightarrow S = -3. \end{aligned} \quad (8.62)$$

Эта классификация позже нашла естественное объяснение в терминах кварковой структуры адронов: каждая единица странности связана с заменой одного из легчайших  $u$ - (электрический заряд  $2e/3$ ) или  $d$ - (заряд  $-e/3$ ) кварков с нулевой  $S = 0$  странностью на  $s$ -кварк с зарядом  $-e/3$  и странностью  $-1$ . В адронных взаимодействиях каоны аналогичны пионам, они также имеют квантовые числа спина и чётности  $J^P = 0^-$  (псевдоскалярные мезоны), в то время как гипероны являются аналогами нуклонов (спин  $1/2$ ). Можно представлять появление странного кварка как внутреннее возбуждение  $d$ -кварка в  $s$ -состояние. *Сохранение странности* в сильных взаимодействиях объясняет отсутствие быстрых распадов гиперонов в нестранные частицы, нуклоны и пионы. Также благодаря этому сохранению странные частицы могут рождаться в столкновениях нестранных адронов только парами, как в реакции (8.61), где полная странность продуктов равна нулю. Это называется *ассоциативным рождением*.

Сравним, например, две на вид похожие реакции,

$$\pi^- + p \rightarrow \Sigma^- + K^+ \quad \text{и} \quad \pi^- + p \rightarrow \Sigma^+ + K^-. \quad (8.63)$$

Только первая из них допускается сильными взаимодействиями; во второй реакции странность не сохраняется,  $S_f = -2 \neq S_i = 0$ . Поскольку все гипероны имеют отрицательную странность, при столкновениях нуклонов только каоны с  $S = +1$ , т. е.  $K^+$  и  $K^0$  могут рождаться вместе с гиперонами. Их античастицы  $K^-$  и  $\bar{K}^0$  имеют  $S = -1$  и могут рождаться только вместе с антигиперонами  $\bar{\Lambda}$  и  $\bar{\Sigma}$ , которые имеют  $S = +1$ . Другая сохраняющаяся величина в сильных взаимодействиях — это *барионный заряд*, равный  $+1$  для протона, нейтрона и гиперонов и  $-1$  для их античастиц. Следовательно, для создания антигиперонов нужны исходные антинуклоны.

### 8.10. Нейтральные каоны и $\mathcal{CP}$ -чётность

Здесь мы обсудим одно из наиболее впечатляющих приложений основных правил квантовой механики — распад нейтральных каонов,  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ . Эти распады управляются слабыми взаимодействиями, и мы предполагаем, что слабые взаимодействия нарушают странность, но инвариантность по отношению к комбинированной инверсии  $\mathcal{CP}$  всё ещё сохраняется.

Начнём с *двухпионного* распада

$$K^0 \rightarrow 2\pi^0 \quad (8.64)$$

в системе покоя каона. Нейтральный пион  $\pi^0$  обладает определённой отрицательной  $\mathcal{CP}$ -чётностью: при пространственной инверсии  $\mathcal{P}$  его волновая функция меняет знак как любой псевдоскаляр (включая также  $K^0$ ), в то время как при зарядовом сопряжении  $\pi^0$  не меняется, поэтому  $\mathcal{CP}|\pi^0\rangle = -|\pi^0\rangle$ . Это ясно в кварковой модели, где мезоны построены как пары кварк-антикварк. Кварк и антикварк, подобно электрон-позитронным парам, обладают противоположной внутренней чётностью. Тогда  $\mathcal{CP}$ -операция даёт  $-(-)^\ell$ , где  $\ell$  — относительный орбитальный момент кварковой пары, который равен нулю ( $s$ -волна) для лёгких мезонов. Полная  $\mathcal{CP}$ -чётность конечного состояния в процессе (8.64), кроме произведения  $(-)^2 = +1$  внутренних  $\mathcal{CP}$ -чётностей пионов, включает также чётность  $(-)^\ell$  их относительного движения с орбитальным моментом  $\ell$ . Поскольку спины  $K^0$  и  $\pi^0$  равны нулю, сохранение углового момента требует  $\ell = 0$ . Это даёт  $\mathcal{CP}|2\pi^0\rangle = +|2\pi^0\rangle$ , и сохранение  $\mathcal{CP}$ -чётности диктует, что она должна быть также равна  $+1$  для исходного  $K^0$ . Однако из-за наличия странности  $K^0$

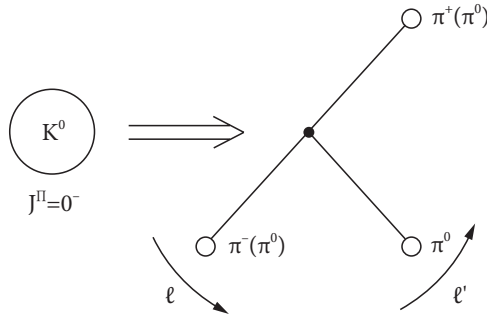


Рис. 8.3. Кинематика векторного сложения орбитальных моментов при трёхмезонном распаде  $K^0$

отличается от  $\bar{K}^0$  и, следовательно, не имеет определённой  $\mathcal{CP}$ -чётности:

$$\mathcal{CP}|K^0\rangle = -|\bar{K}^0\rangle, \quad \mathcal{CP}|\bar{K}^0\rangle = -|K^0\rangle. \quad (8.65)$$

Этот парадокс разрешается таким образом, что состояния  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , рождаемые в сильных взаимодействиях, имеют *определённую странность*, но они не являются правильными линейными комбинациями по отношению к слабым взаимодействиям. (Вспомните, что массивные нейтрино, генерируемые в слабых взаимодействиях, не были правильными линейными комбинациями по отношению к гамильтониану их масс). Если  $\mathcal{CP}$ -чётность сохраняется в слабых взаимодействиях, «диагональными» комбинациями являются таковые с определённой  $\mathcal{CP}$ -чётностью,

$$|K_1^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle), \quad |K_2^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle). \quad (8.66)$$

В соответствии с (8.65) имеем

$$\mathcal{CP}|K_1^0\rangle = |K_1^0\rangle, \quad \mathcal{CP}|K_2^0\rangle = -|K_2^0\rangle. \quad (8.67)$$

При  $\mathcal{CP}$ -сохранении процесс (8.64) разрешён для комбинации  $K_1^0$ , но не для  $K_2^0$ .

Теперь перейдем к *трёхпионным* распадам:

$$K^0 \rightarrow 3\pi^0, \quad K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0. \quad (8.68)$$

Классифицируем конечные состояния, разрешённые в этих процессах. Во всех случаях конечная система должна иметь полный угловой момент

$J = J_K = 0$ . Поскольку спины пионов также нулевые, мы получаем ограничения на орбитальный момент их относительного движения. Полный орбитальный момент  $\mathbf{L} = \boldsymbol{\ell} + \boldsymbol{\ell}'$  построен сложением относительного орбитального момента  $\boldsymbol{\ell}$  пионных пар,  $2\pi^0$  в первом случае или, например,  $\pi^+$  и  $\pi^-$  во втором, и относительного момента  $\boldsymbol{\ell}'$  последнего  $\pi^0$  по отношению к центру масс первой пары, рис. 8.3. Так как  $\mathbf{L} = 0$ , с необходимостью  $\ell = \ell'$ . В первом случае (8.68)  $\ell$  чётно, так как волновая функция двух тождественных пионов должна быть симметрична (см. гл. 9). Значит, здесь  $\ell = \ell'$  чётны. Следовательно,  $\mathcal{CP}$ -чётность состояния  $3\pi^0$  определяется только внутренними  $\mathcal{CP}$ -чётностями пионов и равна  $-1$  для нечётного числа пионов. В итоге только  $\mathcal{CP}$ -нечётная комбинация  $K_2^0$ , уравнение (8.67), может распасться в  $3\pi^0$ . Для второго процесса (8.68)  $\mathcal{CP}$ -чётность системы  $(\pi^+\pi^-\pi^0)$  является произведением  $\mathcal{CP}$ -чётности подсистемы  $(\pi^+\pi^-)$ ,  $\mathcal{CP}$ -чётности  $\pi^0$  (равной  $-1$ ) и чётности  $(-)^{\ell'}$  орбитального движения  $\pi^0$  относительно пары  $(\pi^+\pi^-)$ . В приложении к паре  $(\pi^+\pi^-)$   $\mathcal{C}$ - и  $\mathcal{P}$ -операции эквивалентны, обе меняют  $\pi^+ \leftrightarrow \pi^-$ . Это означает, что  $\mathcal{CP}$ -чётность  $(\pi^+\pi^-)$  пары всегда  $+1$ . Подытожив наши аргументы, мы заключаем, что  $\mathcal{CP}$ -чётность состояния  $|\pi^+\pi^-\pi^0\rangle$  есть  $(-)^{\ell'+1}$ , и для чётных  $\ell = \ell'$  трёхпионные состояния имеют  $\mathcal{CP} = -1$ , в то время как для нечётных  $\ell = \ell'$  они имеют  $\mathcal{CP} = +1$ .

Мы можем классифицировать распады нейтральных каонов, разрешённых сохранением  $\mathcal{CP}$ -чётности:

$$\underline{\mathcal{CP} = +1} : K_1^0 \rightarrow (2\pi^0), (\pi^+\pi^-), (\pi^+\pi^-\pi^0)_{\ell=\ell'=\text{нечётные}}; \quad (8.69)$$

$$\underline{\mathcal{CP} = -1} : K_2^0 \rightarrow (3\pi^0), (\pi^+\pi^-\pi^0)_{\ell=\ell'=\text{чётные}}. \quad (8.70)$$

Высвобождаемая в двухмезонных распадах энергия и соответствующий фазовый объём намного больше, чем в трёхмезонных распадах. Это значит, что вероятность распада (8.69) намного больше, чем в (8.70). В то же время трёхмезонный распад  $K_1^0$  подавляется центробежным барьером, поскольку испускание  $\pi^0$  с  $\ell' = 0$  здесь запрещено. Эксперимент действительно различает два вида нейтральных каонов — долгоживущие  $K_L^0$  и короткоживущие  $K_S^0$  с временами жизни

$$\tau_S = 0,9 \cdot 10^{-10} \text{ с}, \quad \tau_L = 5,4 \cdot 10^{-8} \text{ с} \quad (8.71)$$

соответственно. Быстрый распад  $K_S^0$  происходит в двухпионном канале, в то время как медленный распад  $K_L^0$  идёт в трёхмезонные каналы, поэтому возможно идентифицировать  $K_S^0$  с  $K_1^0$  и  $K_L^0$  с  $K_2^0$ .

В экспериментах *Кронина и др., 1964* [42] были обнаружены редкие события (с относительной вероятностью  $\approx 0,002$ ), когда долгоживущая компонента  $K_L^0$  распадалась на два пиона. Эти эксперименты показывают, что  $\mathcal{CP}$ -чётность не сохраняется в подобных распадах и, на основании  $\mathcal{CPT}$ -теоремы, инвариантность относительно обращения времени нарушается. Строго говоря,  $K_S^0$  является, следовательно, не чистым  $K_1^0$ -состоянием; оно содержит примесь  $K_2^0$ . Аналогично,  $K_L^0$  есть главным образом  $K_2^0$  с небольшой примесью  $K_1^0$ . Вспомним, что  $\mathcal{CP}$ -нарушение делает возможными ненулевые электрические дипольные моменты элементарных частиц (разд. II.7.9). Похожее малое  $\mathcal{CP}$ -несохранение наблюдалось в эксперименте с нейтральными  $B$ -мезонами [43].

### 8.11. Нейтральные каоны и квантовая регенерация

Распады нейтральных каонов ясно демонстрируют фундаментальные принципы квантовой физики, даже если мы забудем о малом  $\mathcal{CP}$ -нарушении. Здесь одно из главных правил квантовой механики, принцип суперпозиции, проявляется уникальным образом. Ситуация некоторым образом аналогична нейтринным осцилляциям, но она более ясная и легче проверяема экспериментально.

Нейтральные каоны, рождённые в сильных взаимодействиях, например (8.61), имеют определённую странность, сохраняющуюся в сильных взаимодействиях. Однако каоны нестабильны и распадаются через слабые взаимодействия (8.64, 8.68—8.70). Если распады происходят с сохранением  $\mathcal{CP}$ -чётности нам нужно представить рождённые  $K^0$  как суперпозицию состояний (8.66) с определённой  $\mathcal{CP}$ -чётностью, но уже без определённой странности, поскольку последняя не сохраняется в слабых взаимодействиях

$$|K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_1^0\rangle + |K_2^0\rangle), \quad |\bar{K}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_2^0\rangle - |K_1^0\rangle). \quad (8.72)$$

Таким образом, рождённый  $K^0$  является комбинацией долгоживущих  $K_2^0$  и короткоживущих  $K_1^0$  компонент.

После интервала времени  $t$ , который много больше, чем время жизни  $\tau_1$   $K_1^0$ , но всё ещё мал по сравнению с временем жизни  $K_2^0$ , короткоживущая компонента  $K_1^0$  вымирает, и пучок каонов состоит из  $K_2^0$ , но имеет только половину интенсивности

$$|K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_1^0\rangle + |K_2^0\rangle) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}|K_2^0\rangle. \quad (8.73)$$

Принимая определение (8.66) для  $K_2^0$  мы видим, что в пучке, который исходно состоял из  $K^0$  со странностью  $+1$ , теперь появились античастицы  $\bar{K}^0$  со странностью  $-1$ :

$$|K^0\rangle \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} |K_2^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle). \quad (8.74)$$

Пусть пучок (8.74) проходит через среду. Сильные взаимодействия с ядрами среды, включая рассеяние каонов и генерацию гиперонов, различны для частиц  $K^0$  и античастиц  $\bar{K}^0$  из-за их различной странности. В столкновениях с ядрами античастицы  $\bar{K}^0$  имеют бóльшую вероятность создания гиперонов с той же странностью  $-1$ , в то время как для частиц (странность  $+1$  отлична от таковой для гиперонов) такие процессы запрещены в сильных взаимодействиях; возможно только рассеяние  $K^0$  на нуклонах.

Предположим, что в достаточно толстой мишени античастицы  $\bar{K}^0$  почти полностью поглощаются в результате неупругих столкновений с ядрами. На выходе из мишени состояние пучка описывается компонентой волновой функции, отвечающей частице (8.74)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} |K^0\rangle = \frac{1}{2} |K^0\rangle. \quad (8.75)$$

Это состояние аналогично начальной точке всего процесса, но с  $1/4$  интенсивности. В свободном движении  $K^0$  из уравнения (8.75) снова может быть представлен суперпозицией (8.39) с двумя экспоненциально распадающимися модами. Таким образом, погибшая короткоживущая компонента  $K_1^0$  регенерировала в среде. После этого мы снова наблюдаем быстрые двухмезонные распады (8.64), характерные для  $K_1^0$ .

В реальном эксперименте регенерация намного более сложная. На практике нужно принять во внимание рассеяние  $K^0$  на мишени, а также неполное поглощение  $\bar{K}^0$ . Вместо (8.75) волновая функция пучка на выходе из регенератора должна записываться как

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\xi |K^0\rangle + \eta |\bar{K}^0\rangle) = \frac{\xi - \eta}{2} |K_1^0\rangle + \frac{\xi + \eta}{2} |K_2^0\rangle, \quad (8.76)$$

где  $\xi$ ,  $|\xi| = 1$  описывает упругое рассеяние  $K^0$ , которое не меняет полной интенсивности пучка, но меняет его фазу, а  $\eta$ ,  $|\eta| < 1$  описывает упругое рассеяние и поглощение  $\bar{K}^0$ . Амплитуда регенерации  $K_1^0$  пропорциональна  $(\xi - \eta)$ . Процесс сильно зависит от малой разности масс  $\Delta m$  между состояниями  $K_1^0$  и  $K_2^0$ . Их виртуальные слабые взаимодействия и, следовательно,

их энергии слегка различны. Эксперимент подтвердил эффект регенерации, который следует из основных квантовых постулатов и позволяет измерить  $\Delta m$ .

### Задача 8.3

Пусть пучок состоит из  $K^0$  в начальный момент времени  $t = 0$ . Времена жизни  $K_1^0$  и  $K_2^0$  равны  $\tau_1$  и  $\tau_2$  соответственно ( $\tau_2 \gg \tau_1$ ). Найти интенсивность  $\bar{K}^0$  как функцию времени.

### Решение.

Исходная волновая функция равна

$$|\Psi(t=0)\rangle = |K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |K_1^0\rangle + |K_2^0\rangle \right). \quad (8.77)$$

Временная эволюция экспоненциально распадающихся состояний с массами  $m_1$  и  $m_2$  для  $K_1^0$  и  $K_2^0$ , соответственно, и с определённой  $\mathcal{CP}$ -чётностью определяется выражением ( $c = \hbar = 1$ )

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{-im_1 t - t/2\tau_1} |K_1^0\rangle + e^{-im_2 t - t/2\tau_2} |K_2^0\rangle \right\}, \quad (8.78)$$

или, вводя снова базисные состояния с определённой странностью

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{2} \left\{ \left[ e^{-im_1 t - t/2\tau_1} + e^{-im_2 t - t/2\tau_2} \right] |K^0\rangle - \left[ e^{-im_1 t - t/2\tau_1} - e^{-im_2 t - t/2\tau_2} \right] |\bar{K}^0\rangle \right\}. \quad (8.79)$$

Амплитуда компоненты  $\bar{K}^0$  со странностью  $S = -1$  равна ( $\Delta m = m_2 - m_1$ )

$$A(\bar{K}^0; t) = -\frac{1}{2} e^{-(i/2)(m_1+m_2)t} \left[ e^{-(i/2)\Delta m t - t/2\tau_1} - e^{-(i/2)\Delta m t - t/2\tau_2} \right], \quad (8.80)$$

а интенсивность, определяемая актами взаимодействия (рождение гиперонов  $\Lambda$  и  $\Sigma$  вдоль траектории обусловлено только наличием  $\bar{K}^0$ ), пропорциональна

$$N(\bar{K}^0; t) \propto e^{-t/\tau_1} + e^{-t/\tau_2} - 2e^{-(t/2)(1/\tau_1+1/\tau_2)} \cos(\Delta m t). \quad (8.81)$$

Поскольку  $\tau_2 \gg \tau_1$ , то в течение интервала времени  $t < \tau_2$  можно наблюдать характерные осцилляции

$$N(\bar{K}^0; t) \propto 1 + e^{-t/\tau_1} - 2e^{-t/2\tau_1} \cos(\Delta m t). \quad (8.82)$$

Период осцилляции определяется разностью масс  $\Delta m$ . Такие эксперименты определяют  $\Delta m \approx 0,4 \cdot 10^{-5}$  эВ — наименьшая разность масс, определённая когда-либо в физике частиц.

**Дополнительная литература:** [44], [45], [47], [49], [50], [51], [52], [53]

Паули доказал, что антисимметричные частицы имеют полуцелый спин, симметричные частицы имеют целый спин. Исключения неизвестны.

Э. Ферми. «Лекции по квантовой механике»

## Глава 9

### Тождественные частицы

#### 9.1. Неразличимые частицы

В нерелятивистской квантовой механике каждый тип частиц характеризуется некоторыми параметрами (масса, спин, заряд и так далее). Можно надеяться, что более глубокая теория сможет предсказать возможные значения этих параметров. Мы принимаем их просто как экспериментальные исходные данные. Эти параметры *идентичны* для всех частиц данного типа. Мы подразделяем частицы на классы, и те, что принадлежат одному классу, *неразличимы*. Это подразделение однозначно, поскольку признаки, определяющие класс — квантовые числа — имеют *дискретные* спектры значений. Эта дискретность важна для стандартного решения *парадокса Гиббса*, в котором рассматривается энтропия смешивания различных и одинаковых газов (см. гл. 17).

В классической механике система тождественных частиц является просто предельным случаем системы общего вида в случае, когда значения параметров случайно оказались одинаковыми. В квантовой механике тождественность частиц приводит к новым физическим явлениям, основанным на переплетении статистики и квантовой интерференции.

Пусть классические уравнения движения имеют решение, в котором частица  $a$  движется по траектории  $A$ , а такая же частица  $b$  движется по траектории  $B$ . Вследствие одинаковости частиц существуют переставленные начальные условия, приводящие к решению, в котором  $a$  движется по пути  $B$ , а  $b$  по пути  $A$ . Частица, помеченная  $a$ , в конце пути остаётся той же самой (по какому бы пути она ни двигалась), несмотря на то, что две пары траекторий выглядят одинаково, и соответствующие точки в двух решениях проходятся в те же моменты времени и с теми же скоростями. В квантовой механике не существует меток для различения тождественных частиц. Можно приготовить неперекрывающиеся начальные условия,

выстреливая два протона из различных источников. Допустим, они взаимодействуют или просто проходят по перекрывающимся пространственным областям. После этого невозможно различить два конечных состояния, показанные на рис. 9.1.

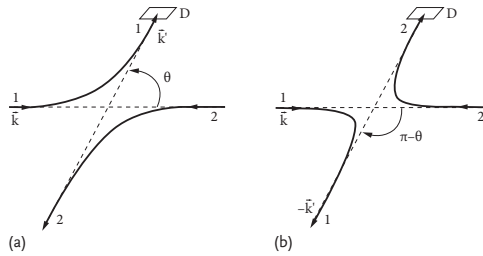


Рис. 9.1. Два пути тождественных частиц, неразличимые в квантовой механике

Поэтому складываются *амплитуды*, а не вероятности двух событий, и мы получаем качественно новое явление — интерференцию (конструктивную или деструктивную) тождественных частиц.

## 9.2. Перестановочная симметрия

Все характеристики тождественных частиц  $a$  и  $b$  в гамильтониане  $H(a, b)$  в точности одинаковы. Здесь мы используем символы частиц  $a, b, \dots$  для полных наборов одночастичных переменных, включая спин и другие внутренние степени свободы.

Чтобы сформулировать ситуацию в терминах симметрий, введём обменный оператор  $\hat{\mathcal{P}}_{ab} \equiv \hat{\mathcal{P}}_{ba}$ , который переставляет ( $a \leftrightarrow b$ ) *все переменные* наборов  $a$  и  $b$  в волновой функции

$$\hat{\mathcal{P}}_{ab}\Psi(a, b) = \Psi(b, a). \quad (9.1)$$

Можно также ввести подобные операторы, переставляющий только часть переменных. *Оператор Майорана*  $\hat{\mathcal{P}}_{ab}^r$  переставляет только пространственные координаты  $\mathbf{r}_a \leftrightarrow \mathbf{r}_b$ ; *оператор Бартлетта*  $\hat{\mathcal{P}}_{ab}^\sigma$  переставляет только спиновые координаты частиц  $a$  и  $b$ . Полный обменный оператор (9.1) обычно называют *оператором Гейзенберга*. Если нет дополнительных переменных, то, очевидно,

$$\hat{\mathcal{P}}_{ab} = \hat{\mathcal{P}}_{ab}^r \hat{\mathcal{P}}_{ab}^\sigma. \quad (9.2)$$

Каждый из обменных операторов, применённый дважды, даёт единицу,

$$(\hat{\mathcal{P}}_{ab})^2 = (\hat{\mathcal{P}}_{ab}^r)^2 = (\hat{\mathcal{P}}_{ab}^\sigma)^2 = 1. \quad (9.3)$$

Поэтому любой обменный оператор имеет два собственных значения, равных  $\pm 1$ , а его собственные функции делятся на два класса, *симметричные* и *антисимметричные* по отношению к перестановке соответствующих переменных. Произвольная функция не имеет симметрии, но её всегда можно представить как суперпозицию функций с определённой симметрией:

$$\Psi(a, b) \equiv \frac{1}{2} [\Psi(a, b) + \Psi(b, a)] + \frac{1}{2} [\Psi(a, b) - \Psi(b, a)]. \quad (9.4)$$

В *многочастичной* системе из  $N$  тождественных частиц можно ввести  $N(N-1)/2$  обменных операторов  $\hat{\mathcal{P}}_{ab}$ . Их последовательное применение позволяет прийти к произвольной *перестановке* переменных по отношению к исходной функции  $\Psi(a, b, \dots)$ . Полное число получаемых таким образом функций равно числу  $N!$  различных перестановок. Ситуация в многочастичном случае сложнее, чем в (9.4), из-за возрастающего количества *смешанных симметрий*.

Проблемы, возникающие при  $N > 2$ , связаны с тем, что обменные операторы, затрагивающие несколько объектов, *не коммутируют*. Например, для  $N = 3$  мы имеем

$$\hat{\mathcal{P}}_{13}\hat{\mathcal{P}}_{12}\Psi(1, 2, 3) = \hat{\mathcal{P}}_{13}\Psi(2, 1, 3) = \Psi(3, 1, 2), \quad (9.5)$$

тогда как действуя в противоположном порядке, мы получаем результат, отличный от (9.5):

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}\hat{\mathcal{P}}_{13}\Psi(1, 2, 3) = \hat{\mathcal{P}}_{12}\Psi(3, 2, 1) = \Psi(2, 3, 1), \quad (9.6)$$

то есть  $[\hat{\mathcal{P}}_{13}, \hat{\mathcal{P}}_{12}] \neq 0$ . Правильное коммутационное соотношение имеет вид

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}\hat{\mathcal{P}}_{13} = \hat{\mathcal{P}}_{23}\hat{\mathcal{P}}_{12}. \quad (9.7)$$

Будучи некоммутативными, обменные операторы не имеют полного набора общих собственных функций. Функции смешанной симметрии ведут себя по-разному при разных перестановках. Это противоречит нашей идее *неразличимости* частиц, поскольку перестановка тождественных частиц не может изменить физику.

Однако два класса функций всегда являются собственными функциями *всех* перестановок. Эти исключительные функции — полностью симметричные и полностью антисимметричные. Действительно, пусть  $\Psi(1, 2, 3)$  — собственная функция всех трёх операторов  $\hat{\mathcal{P}}_{12}$ ,  $\hat{\mathcal{P}}_{23}$  и  $\hat{\mathcal{P}}_{31}$  с (равными  $\pm 1$ ) собственными значениями  $\lambda_{12}$ ,  $\lambda_{23}$  и  $\lambda_{31}$ , соответственно. Тожество (9.7), применённое к  $\Psi(1, 2, 3)$ , даёт  $\lambda_{12}\lambda_{13} = \lambda_{23}\lambda_{12}$ . Это показывает, что  $\lambda_{13} = \lambda_{23}$ ; таким же образом мы получаем  $\lambda_{13} = \lambda_{12}$ . Таким образом, все три собственных значения *равны*. В общем случае  $\Psi(1, 2, \dots, N)$  является собственной функцией всех операторов  $\hat{\mathcal{P}}_{ab}$  тогда и только тогда, когда все собственные значения  $\lambda_{ab}$  равны; их общее значение есть  $+1$  (*полностью симметричная* функция  $\Psi_S$ ) или  $-1$  (*полностью антисимметричная* функция  $\Psi_A$ ).

Мы заключаем, что только функции  $\Psi_S$  или  $\Psi_A$  совместимы с идеей неразличимости частиц. Достаточно взять функции правильной симметрии в качестве начальных условий для эволюции по времени. Будучи симметричным относительно любой перестановки переменных тождественных частиц, многочастичный гамильтониан коммутирует со всеми обменными операторами

$$[\hat{\mathcal{P}}_{ab}, \hat{H}] = 0. \quad (9.8)$$

Поэтому все операторы  $\hat{\mathcal{P}}_{ab}$  являются интегралами движения, и начальная симметрия волновой функции сохраняется со временем. Симметрия не может быть нарушена возмущением, поскольку для тождественных частиц гамильтониан возмущения также симметричен, так что законы сохранения (9.8) остаются в силе. Уравнение (9.8) в действительности является формальным определением *неразличимости*.

Конечно, нет необходимости строить начальное состояние, симметризованное или антисимметризованное по всем частицам данного типа во Вселенной. Если частицы не взаимодействуют и не перекрываются, нет никакой разницы, тождественны они или нет; физические предсказания одинаковы, когда квантовая интерференция исключена.

### 9.3. Бозоны и фермионы

Теорема квантовой теории поля о связи спина со статистикой (*В. Паули*, 1940) утверждает, что волновые функции тождественных частиц целого спина всегда должны быть симметричны, а полуцелого спина — антисимметричны по отношению к любой перестановке всех переменных тождественных частиц. Это формально следует из законов преобразования волновых уравнений, описывающих соответствующие поля в четырёхмер-

ном пространстве Минковского. Только при правильном выборе симметрии относительно перестановок квантованное поле будет подчиняться принципу причинности и иметь положительно определённую энергию частиц — квантов поля. В некотором смысле это геометрическое свойство мира Минковского, которое несправедливо в некоторых моделях низших размерностей. Для бесспиновых частиц ограничения, налагаемые симметрией, следуют [54] из отождествления точек  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и  $(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$  в шестимерном конфигурационном пространстве и свойства непрерывности волновой функции в этом пространстве (нам встречался случай двух тождественных пионов (частиц спина 0) в распадах нейтральных каонов, разд. 8.10). Однако это доказательство вряд ли можно обобщить на частицы с ненулевым спином; спин является существенно релятивистским свойством.

Связь спина со статистикой значительно уменьшает число допустимых многочастичных состояний. Разрешены только состояния с правильной перестановочной симметрией,  $\Psi_S$  и  $\Psi_A$ , и тип симметрии фиксирован для частиц данного сорта. Статистические свойства, сильно зависящие от числа доступных состояний, существенно различны в этих двух случаях. Частицы с целым спином подчиняются симметричной статистике *Бозе—Эйнштейна* и называются *бозонами*. Частицы с полуцелым спином подчиняются антисимметричной статистике *Ферми—Дирака* и называются *фермионами*. Вещество сделано главным образом из фермионов — лептонов и барионов, на более глубоком уровне — кварков. Впрочем, мы всё ещё не знаем состав *тёмной материи* во Вселенной.

При высокой энергии возбуждения (температуре), когда число доступных квантовых состояний велико и среднее число частиц на одно квантовое состояние  $\ll 1$ , квантовые эффекты перекрытия можно игнорировать, так что многочастичная система переходит к классическому пределу *статистики Больцмана*. Легко оценить, когда квантовые статистические эффекты становятся существенными для классического газа. Средняя энергия частицы  $\bar{\epsilon} = (3/2)T$  (мы выражаем температуру в энергетических единицах, полагая постоянную Больцмана  $k_B = 1$ ; переходный множитель к тепловым единицам  $1 \text{ эВ} = 11\,600 \text{ К}$ ). Средний импульс частицы массы  $m$ ,  $p \sim \sqrt{m\bar{\epsilon}} \sim \sqrt{mT}$ , соответствует дебройлевской длине волны теплового движения  $\lambda_T \sim \hbar/p \sim \hbar/\sqrt{mT}$ . При уменьшении температуры  $\lambda_T$  увеличивается, постепенно достигая величины порядка расстояния между частицами  $r_0 \simeq n^{-1/3}$ , где  $n = N/V$  — плотность газа (число частиц в единице объёма). Волновые пакеты, соответствующие разным частицам,

начинают перекрываться при *температуре вырождения*  $T_d$ :

$$T_d \simeq \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m}. \quad (9.9)$$

Тогда картина классического газа, состоящего из различных пространственно разделённых частиц, теряет смысл, и необходимо применять *квантовую статистику*.

Для электронов в типичных металлах температура вырождения порядка 1–10 эВ, что выше температуры плавления. Это значит, что электроны в металлах должны рассматриваться как *вырожденный* квантовый газ. В полупроводниках можно регулировать плотность и, следовательно, температуру вырождения. Для нуклонов при плотности  $n \approx 0,17 \text{ фм}^{-3}$ , приблизительно соответствующей внутренности ядер, оценка (9.9) даёт  $T_d \sim 10 \text{ МэВ}$ . Это соответствует энергии возбуждения порядка сотен МэВ в средних ядрах с массовым числом  $A \sim 100$ . В низкоэнергетической ядерной физике мы находимся гораздо ниже  $T_d$ , так что здесь, как и в металлах, эффекты квантовой статистики имеют решающее значение.

Здесь может быть уместно одно замечание. Во многих случаях *составные* объекты ведут себя как единое целое. Тогда для нахождения типа квантовой статистики нужно сосчитать число фермионных составляющих. Тип статистики нейтральных атомов определяется чётностью числа *нейтронов* в ядре (число протонов равно числу электронов). Атом  ${}^{87}_{37}\text{Rb}_{50}$  состоит из ядра (37 протонов и 50 нейтронов) со спином (полным моментом импульса ядра)  $3/2$  и 37 атомных электронов с полным спином  $1/2$  (который фактически определяется одним внешним валентным электроном). Такие атомы образуют Бозе-газ. *Бозе-конденсация* паров рубидия при сверхнизких температурах порядка  $2 \times 10^{-8} \text{ К}$  наблюдалась в 1995 г., показав первый пример этого давно предсказанного явления: все тождественные атомы занимают низший энергетический уровень в сосуде (*атомной ловушке*) [55]. Игнорируя взаимодействие между атомами, мы можем записать такую многочастичную волновую функцию как произведение одинаковых одночастичных функций

$$\Psi(1, \dots, N) = \psi_0(1)\psi_0(2) \cdots \psi_0(N). \quad (9.10)$$

Эта функция, очевидно, *симметрична*. Температуру конденсации, ниже которой макроскопическая доля атомов занимает одно микроскопическое состояние, можно оценить из (9.9) для плотности  $n \sim 10^{12} \text{ см}^{-3}$  в ловушке. Атомы находятся в сверхтонком состоянии (разд. I.23.6) с полным момен-

том импульса  $F = 2$ , который следует считать спином атома как целого. Ясно, что такое рассмотрение является приближённым. При высоких плотностях электронные оболочки разных атомов начинают перекрываться, и становится существенной фермионная природа электронов, не допускающая полной симметрии волновой функции. Строго говоря, нуклоны также не являются простыми фермионами, поскольку на малых расстояниях начинают чувствоваться составляющие их кварки и глюоны. Обычно предполагается, что при нормальной ядерной плотности такие эффекты вряд ли существенны. Однако эта проблема не изучена подробно.

### Задача 9.1

Рассмотрите две тождественные частицы на одночастичной орбите, характеризующейся угловым моментом  $j$ . Найдите разрешённые значения углового момента  $J$  двухчастичной системы.

#### Решение.

Как показано в задаче 22.4 в т. 1, симметрия двухчастичной волновой функции есть  $\mathcal{P}_{12} = (-)^{2j+J}$ . Для бозонов  $j$  целое, и требование статистики  $\mathcal{P}_{12} = +1$  приводит к чётным  $J$ . Для фермионов  $j$  полуцелое,  $2j$  — нечётное целое, и требование  $\mathcal{P}_{12} = -1$  опять даёт чётные  $J$ . В обоих случаях разрешены только чётные значения  $J$ :

$$J = 0, 2, \dots, 2j \text{ для бозонов, } J = 0, 2, \dots, 2j - 1 \text{ для фермионов.} \quad (9.11)$$

Полезно также вспомнить, что, как показывает уравнение (20.68) в т. I, двукратное применение операции обращения времени по-разному действует на системы с целым и полуцелым угловым моментом. Поскольку при правильной связи спина со статистикой первый (второй) случай реализуется для чётного (нечётного) числа фермионов, операция  $\mathcal{T}^2$  может различить эти два случая.

## 9.4. Волновые функции невзаимодействующих частиц

Рассмотрим сначала систему двух невзаимодействующих частиц, которые могут занимать два одночастичных состояния (*орбитали*)  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Индексы 1 и 2 обозначают полные наборы переменных, характеризующих частицу (а не метки частиц!). Полная волновая функция  $\Psi(1, 2)$  является произведением одночастичных функций, так что имеются четыре

возможности:

$$\psi_1(1)\psi_1(2), \quad \psi_2(1)\psi_2(2), \quad \psi_1(1)\psi_2(2), \quad \psi_2(1)\psi_1(2). \quad (9.12)$$

Для различных частиц разрешены все варианты (9.12). В случае статистики Бозе мы должны симметризовать все функции; впрочем, первое и второе произведения в (9.12) и так симметричны. Скомбинировав третье и четвёртое произведения в нормированную симметричную комбинацию  $\Psi_S$ , мы получаем

$$\underline{\text{Бозе}}: \quad \psi_1(1)\psi_1(2), \quad \psi_2(1)\psi_2(2), \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_2(1)\psi_1(2)]. \quad (9.13)$$

Оставшаяся нормированная антисимметричная комбинация  $\Psi_A$  является единственной разрешённой для фермионов:

$$\underline{\text{Ферми}}: \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_2(1)\psi_1(2)]. \quad (9.14)$$

Заметим, что функции разных классов симметрии взаимно ортогональны. Комбинации с правильной симметрией в (9.13) и (9.14) демонстрируют простейшие примеры квантовой *запутанности* тождественных частиц без динамического взаимодействия (см. гл. 19).

Фермионная функция (9.14) имеет вид *слэтеровского детерминанта*

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) \end{vmatrix} \quad (9.15)$$

с элементами  $\psi_r(c)$ , где номер строки  $r$  соответствует занятым орбиталам, а номер столбца  $c$  нумерует частицы. В *Ферми-системе*  $N$  тождественных частиц волновая функция меняет знак при любом обмене (транспозиции)  $\mathcal{P}_{ab}$ . При перестановке, содержащей  $p$  транспозиций, результирующее изменение знака составляет  $(-)^p$ . Полное число перестановок равно  $N!$ . Если для различных частиц волновая функция была бы  $\Psi(1, \dots, N)$ , то для тождественных фермионов соответствующая нормированная волновая функция принимает вид

$$\Psi_A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-)^p \hat{\mathcal{P}} \Psi(1, \dots, N). \quad (9.16)$$

Здесь сумма берётся по всем  $N!$  перестановкам с учётом их знаков. Подобным образом, волновая функция  $N$  тождественных бозонов может быть

записана в полностью симметризованном виде

$$\Psi_S(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \Psi(1, \dots, N). \quad (9.17)$$

Различие между волновыми функциями для двух типов статистики очень существенно. Вероятность найти два бозона в одной и той же точке пространства отлична от нуля, тогда как эта вероятность для двух фермионов с параллельными спинами равна нулю, что демонстрирует статистическое «отталкивание».

В случае невзаимодействующих частиц фермионная волновая функция (9.16) становится слэтеровским детерминантом (9.15) для  $N$  частиц

$$\Psi_A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\psi_r(c)\}, \quad (9.18)$$

где  $r$  нумерует взаимно ортогональные одночастичные орбитали, занятые частицами в данном многочастичном состоянии, и нам требуется по крайней мере  $N$  независимых орбиталей  $\psi_r$ , чтобы разместить  $N$  фермионов. Слэтеровские детерминанты автоматически антисимметризованы, потому что любая перестановка двух столбцов (или строк) меняет знак детерминанта. Нормировочный множитель перед детерминантом для  $N$  фермионов равен  $1/\sqrt{N!}$ . Если бы число доступных орбиталей было меньше  $N$ , то некоторые частицы были бы вынуждены находиться на одной орбитали. В этом случае мы получаем детерминант с совпадающими строками, равный нулю. Мы приходим к *принципу исключения Паули*: в невзаимодействующей Ферми-системе никакие две частицы не могут занимать одну и ту же орбиталь. Принцип Паули является частным случаем общего требования антисимметрии. Любая функция с более чем одной тождественной частицей на одной и той же орбитали (как, например, первые два произведения в (9.12)) с неизбежностью симметрична по переменным этих частиц.

Очень удобно, особенно в случае больших  $N$ , описывать полную многочастичную волновую функцию в терминах *чисел заполнения* (средних значений чисел частиц на каждой орбитали). В случае невзаимодействующих фермионов и ортогональных орбиталей числа заполнения могут принимать только значения 0 (пустая орбиталь) и 1 (заполненная орбиталь). В случае невзаимодействующих бозонов разрешены любые целые числа заполнения от 0 до  $N$ , последний случай соответствует полному конденсату. Представление чисел заполнения будет развито в гл. 11 в

схему *вторичного квантования* с операторами, действующими на числа заполнения (создавая и уничтожая частицы).

### Задача 9.2

$N$  тождественных частиц распределены по  $\Omega$  ортогональным одночастичным орбиталам. Найти полное число  $\mathcal{N}(N, \Omega)$  возможных многочастичных состояний, имеющих правильную симметрию для бозонов и фермионов.

#### Решение.

Для *фермионов* полное число  $\mathcal{N}$  разрешенных состояний можно вычислить, комбинируя в соответствии с принципом Паули  $\Omega$  возможностей для первой частицы, оставшиеся  $\Omega - 1$  для второй,  $\Omega - 2$  для третьей и так далее, вплоть до  $\Omega - (N - 1)$ ; конечно, должно быть  $N \leq \Omega$ . Поскольку частицы тождественны, результат следует разделить на  $N!$

$$\underline{\text{Ферми}} : \quad \mathcal{N}(N, \Omega) = \frac{\Omega!}{(\Omega - N)! N!} . \quad (9.19)$$

Как и должно быть, состояние единственно  $\mathcal{N} = 1$  для пустого пространства  $N = 0$ , точно так же, как и для полностью заполненного пространства  $N = \Omega$ . Ответ симметричен по отношению к *частицам* ( $N$ ) и *дыркам* ( $\Omega - N$ ).

Для *бозонов* задача эквивалентна следующей. Разместим  $N$  частиц вдоль прямой и вставим  $\Omega - 1$  границ между ними, образуя  $\Omega$  ячеек. Каждое расположение границ даёт конкретное распределение бозонов по  $\Omega$  ящикам. Полное число объектов (частиц + стенок) равно  $\Omega + N - 1$ . Число различных конфигураций  $\Omega - 1$  стенок даёт ответ

$$\underline{\text{Бозе}} : \quad \mathcal{N}(N, \Omega) = \frac{(\Omega + N - 1)!}{(\Omega - 1)! N!} . \quad (9.20)$$

Для *различимых* частиц число состояний есть просто  $\Omega^N$ . Это следует из обоих уравнений (9.19) и (9.20) после исключения перестановочного множителя  $N!$  в знаменателе и перехода к классическому пределу низкой плотности  $N \ll \Omega$ .

С учётом *взаимодействия* между частицами простые произведения одночастичных орбиталей (симметризованные, как в (9.10), или антисимметризованные, как в слэтеровском детерминанте (9.15)) уже не являются стационарными состояниями. Процессы взаимодействия переводят частицы с одних орбиталей на другие. Присутствие или отсутствие других частиц

существенно влияет на амплитуды переходов. Так, переход фермиона на занятую орбиталь запрещён.

Слэтеровские детерминанты для всех возможных распределений чисел заполнения дают полный набор ортонормированных антисимметричных волновых функций даже для Ферми-системы со взаимодействием. Этот набор часто используется как базис для решения многочастичной задачи. Отметим, что для этого можно использовать любой полный набор одночастичных орбиталей, хотя на практике некоторый выбор может оказаться более удобным. Числа заполнения различны в разных представлениях. В суперпозиции, представляющей истинное стационарное состояние, средние числа заполнения являются, вообще говоря, дробными (между 0 и 1). Это верно и для возбуждённых Ферми-систем, рассматриваемых с помощью теплового ансамбля.

### Задача 9.3

Иногда удобно рассматривать  $N$  частиц, распределённых по  $N$  неортонормальным орбиталям  $\psi_\nu$ ,  $\nu = 1, \dots, N$  так, что (анти-)симметризованная  $N$ -частичная волновая функция даётся формулами (9.16) и (9.17), где  $\Psi(1, \dots, N)$  — просто произведение  $\psi_1(1) \cdots \psi_N(N)$ . Найдите перекрытие двух таких функций  $\Psi$  и  $\Phi$ , построенных на наборах  $\{\psi_\nu\}$  и  $\{\varphi_\mu\}$  соответственно.

### Решение.

Если обе многочастичные функции этого типа нормированы, результат для фермионов может быть выражен

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \frac{\det \Theta_{\nu\mu}}{\sqrt{|\det \Theta_{\nu\nu'}| \cdot |\det \Theta_{\mu\mu'}|}} \quad (9.21)$$

через детерминанты матриц скалярных произведений

$$\Theta_{\nu\mu} = \langle \psi_\nu | \varphi_\mu \rangle. \quad (9.22)$$

Для бозонов мы получаем *перманенты*, такие же комбинации скалярных произведений, как в (9.21), но со всеми знаками плюс.

## 9.5. Двухнуклонные состояния

В качестве первого реалистического примера мы рассмотрим простейшую взаимодействующую ядерную систему  $N = 2$  нуклонов. Здесь можно ясно увидеть, что отличает систему протон—нейтрон ( $p-n$ ) от системы двух

тождественных нуклонов,  $p-p$  или  $n-n$ , несмотря на то что ядерные силы в различных парах почти одинаковы (*зарядовая независимость* сильных взаимодействий). Поскольку движение центра масс двухчастичной системы может быть отделено в общем виде (разд. 11.1), и это общее движение полностью симметрично в предположении равенства масс протона и нейтрона, мы будем интересоваться только относительным движением.

Волновые функции относительного движения двух частиц имеют радиальную, угловую и спиновую части. Можно построить полный набор состояний, используя сферические гармоники  $Y_{\ell m}(\mathbf{n})$  для угловой части ( $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$  — единичный вектор вдоль  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ). Это определяет чётность  $\Pi = (-)^{\ell}$ . Мы будем использовать стандартные спектроскопические обозначения  $s, p, d, f, g, h, i, j, \dots$  для значений  $0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$  орбитального момента  $\ell$ . Спиновая функция  $\chi_{SS_z}$  двухнуклонной системы, обсуждавшаяся в § 22.3, может относиться к значениям полного спина

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 \quad (9.23)$$

$S = 0$  (синглет) или  $S = 1$  (триплет). Триплетные состояния симметричны по отношению к обмену спиновых переменных, осуществляемому оператором Бартлетта  $\hat{P}^{\sigma}$ , а синглетное состояние антисимметрично

$$\mathcal{P}^{\sigma} = (-)^{S+1}. \quad (9.24)$$

В двухнуклонной системе пространственная инверсия меняет знак относительных координат и потому эквивалентна перестановке пространственных координат, производимой оператором Майорана  $\hat{P}^r$ . Вспомнив (9.2), мы получаем

$$\mathcal{P}^r = (-)^{\ell}, \quad \mathcal{P} = \mathcal{P}^r \mathcal{P}^{\sigma} = (-)^{\ell+S+1}. \quad (9.25)$$

В общем случае относительный орбитальный момент  $\ell$  и спин  $\mathbf{S}$  пары не сохраняются. Однако полная вращательная инвариантность гарантирует сохранение полного момента импульса

$$\mathbf{J} = \ell + \mathbf{S}. \quad (9.26)$$

Состояние с данными значениями  $\ell$  и  $S$  может иметь  $J = \ell$  в случае спинового синглета или  $J = \ell, \ell \pm 1$  в случае спинового триплета (в исключительном случае триплета с  $\ell = 0$  возможно только  $J = S = 1$ ). Как и в атомной спектроскопии, получившиеся состояния будут обозначаться  $^{2S+1}(\ell)_J$ , где  $(\ell)$  — символ орбитального момента. В этих обозначениях классификация всех возможных двухнуклонных состояний приведена в табл. 9.1.

Таблица 9.1. Квантовые числа двухнуклонных состояний

	$J$	$\ell = 0$	1	2	3	4
Синглеты, $S = 0$	$J = \ell$	$^1s_0$	$^1p_1$	$^1d_2$	$^1f_3$	$^1g_4$
Триплеты, $S = 1$	$J = \ell - 1$		$^3p_0$	$^3d_1$	$^3f_2$	$^3g_3$
	$J = \ell$		$^3p_1$	$^3d_2$	$^3f_3$	$^3g_4$
	$J = \ell + 1$	$^3s_1$	$^3p_2$	$^3d_3$	$^3f_4$	$^3g_5$

Поскольку единственными точными интегралами движения являются  $J$  и (если не учитывать слабые взаимодействия) чётность  $\Pi = (-)^{\ell}$ , удобно использовать более короткие символы  $J^{\Pi}$ , которые содержат только эти квантовые числа. В двухнуклонной системе чётность синглетных состояний  $(-)^{\ell} = (-)^J$  однозначно определяется моментом  $J$ . В случае триплетных состояний квантовые числа  $J$  и  $\Pi$  не определяют состояние однозначно: есть две возможности с разными  $\ell = J \pm 1$ . Триплетные состояния с  $\ell = J$ , а также состояние  $^3p_0$  с  $J^{\Pi} = 0^{-}$ , единственны. Организуем таблицу состояний по-новому, в соответствии с точными квантовыми числами  $J^{\Pi}$  сильного взаимодействия (табл. 9.2).

Таблица 9.2.  $J^{\Pi}$ -классификация двухнуклонных состояний

	$0^{+}$	$0^{-}$	$1^{+}$	$1^{-}$	$2^{+}$	$2^{-}$	$3^{+}$	$3^{-}$	$4^{+}$
Синглеты	$^1s_0$			$^1p_1$	$^1d_2$			$^1f_3$	$^1g_4$
Триплеты		$^3p_0$	$^3s_1, ^3d_1$	$^3p_1$	$^3d_2$	$^3p_2, ^3f_2$	$^3d_3, ^3g_3$	$^3f_3$	$^3g_4$

В принципе взаимодействие может смешивать состояния с одинаковыми  $J^{\Pi}$ , но разными  $\ell$  или  $S$ . Существуют два типа возможных суперпозиций, совместимых с сохранением  $J^{\Pi}$ . Во-первых, могут смешиваться триплетные и синглетные состояния с одинаковым  $\ell$ , например  $^1p_1$  и  $^3p_1$  («вертикальное смешивание»). Во-вторых, разрешена суперпозиция триплетных состояний с  $\ell = J \pm 1$  («горизонтальное смешивание»). Механизм горизонтального смешивания связан с тензорными силами, которые строятся как произведения тензоров второго ранга в спиновом пространстве  $\propto s_{1i}s_{2j} - \frac{1}{3}(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2)\delta_{ij}$  и орбитального квадрупольного оператора  $\propto Y_{2\mu}(\mathbf{n})$ , последний вызывает смешивание двух орбитальных моментов с той же чётностью и  $\Delta\ell = 2$ .

Отметим, что состояния, доступные для вертикального смешивания, имеют противоположную перестановочную симметрию (9.25), а именно одинаковое поведение по отношению к  $\mathcal{P}^r$ , но противоположное по отношению к  $\mathcal{P}^\sigma$ . В отличие от этого, горизонтальное смешивание комбинирует два состояния с одинаковой симметрией. Поэтому физика, лежащая в их основе, сильно различается. В действительности горизонтальное смешивание значительно сильнее, и единственно возможное *связанное* состояние пары нуклонов — это дейтрон,  $d \equiv {}^2_1\text{H}_1$ ,  $p-n$ , волновая функция которого является суперпозицией  ${}^3s_1 + {}^3d_1$ , см. табл. 9.2.

Мы перечислили двухнуклонные состояния, не упоминая, различны ли нуклоны, как в случае дейтрона, или тождественны. Однако в последнем случае только *антисимметричные* состояния со значением  $\mathcal{P} = -1$  обменного оператора (9.25) разрешены статистикой Ферми. Следовательно, для  $n-n$ - или  $p-p$ -систем возможен только подкласс состояний, в которых орбитальная ( $\mathcal{P}^r$ ) и спиновая ( $\mathcal{P}^\sigma$ ) симметрии *противоположны*, а именно

$$\underline{\text{чётные синглеты}} : \quad 0^+({}^1s_0), \quad 2^+({}^1d_2), \quad 4^+({}^1g_4), \dots ; \quad (9.27)$$

$$\underline{\text{нечётные триплеты}} : \quad 0^-({}^3p_0), \quad 1^-({}^3p_1), \quad 2^-({}^3p_2 + {}^3f_2), \quad 3^-({}^3f_3), \dots \quad (9.28)$$

Можно было бы ожидать, что благодаря зарядовой независимости ядерных сил из существования дейтрона (электрический заряд  $Z = 1$ ) следует существование связанных состояний  $n-n$  ( $Z = 0$ , динейтрон) и  $p-p$  ( $Z = 2$ , дипротон или  ${}^2\text{He}$ ). Таких связанных состояний не существует. Причину этого можно понять следующим образом.

Дейтрон с энергией связи 2,225 МэВ (маленькая величина, по ядерным масштабам) не имеет возбуждённых связанных состояний. Поскольку ядерные силы зарядово независимы, гипотетические связанные состояния  $n-n$  и  $p-p$  должны были бы иметь *такие же* квантовые числа  ${}^3s_1 + {}^3d_1$ , что и единственное связанное состояние  $n-p$ . Однако формулы (9.27) и (9.28) говорят нам, что такие состояния запрещены статистикой Ферми. Идея зарядовой независимости должна быть сформулирована как эквивалентность ядерных сил *в одинаковых квантовых состояниях*. Введение *изобарического спина* (или *изоспина*), ещё одной группы  $SU(2)$ , основанной на протоне и нейтроне как двух состояниях *нуклона*, — плодотворная формулировка идеи зарядовой независимости, см. гл. 10. Весь формализм спина переносится на

случай изоспина и даёт сильные предсказания для многонуклонных систем. В мире элементарных частиц работают ещё более высокие симметрии.

#### Задача 9.4

Пионы  $\pi^-$ , частицы со спином 0 и отрицательным электрическим зарядом, могут захватываться на водородоподобную орбиту вокруг ядра и образовывать кулоновский *мезоатом* (оцените энергию связи и размер низшей орбиты для ядра с зарядом  $Z!$ ). Процесс завершается либо распадом (8.36) пиона на мюон и мюонное антинейтрино, либо ядерным захватом пиона. Рассмотрите  $\pi$ -мезоатом дейтерия, где захват пиона из основного мезоатомного состояния (процесс, обусловленный сильным взаимодействием) приводит к ядерной диссоциации на два нейтрона:



Покажите, что процесс (9.29) возможен только в случае, если пион имеет отрицательную внутреннюю чётность (*псевдоскалярная частица*), что использовалось в гл. 8.

#### Решение.

С бесспиновым пионом в основном  $s$ -состоянии мезоатома и спином дейтрона (полным угловым моментом), равным 1, полный угловой момент начального состояния в процессе захвата (9.29) равен  $J_i = 1$ . Поэтому конечное состояние двух нейтронов должно также иметь угловой момент  $J_f = 1$ . Формула (9.29) разрешает единственную комбинацию квантовых чисел двух нейтронов с  $J = 1$ , а именно  ${}^3p_1$  с отрицательной чётностью. Чётность начального состояния совпадает с внутренней чётностью пиона, поскольку для низшей  $s$ -орбиты в мезоатоме  $\ell = 0$ , и состояние дейтрона, комбинация  $s$ - и  $d$ -орбиталей, также чётно. Из сохранения чётности в процессе (9.29) мы заключаем, что пион имеет отрицательную внутреннюю чётность.

#### Задача 9.5

В системе двух тождественных невзаимодействующих бесспиновых бозонов одна частица находится в стационарном состоянии с нормированной волновой функцией  $\psi_1(\mathbf{r})$ , имеющей положительную чётность, а другая — в состоянии с нормированной волновой функцией  $\psi_2(\mathbf{r})$  отрицательной чётности. Определите:

- 1) распределение вероятности координат одной частицы  $w(\mathbf{r})$ , если положение другой частицы произвольно;

- 2) вероятность найти одну частицу в верхнем полупространстве  $z \geq 0$ ;
- 3) вероятность найти обе частицы при  $z \geq 0$ .

Ответьте на те же вопросы для двух фермионов в состоянии с одинаковыми спинами.

Ответьте на те же вопросы для двух различных частиц.

### Решение.

1. Правильно симметризованная волновая функция двух бозонов имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)] . \quad (9.30)$$

Поскольку волновая функция симметрична, требуемая вероятность может быть найдена для любой из частиц, например, для  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}$ , интегрированием по всем возможным положениям  $\mathbf{r}_2$ :

$$w(\mathbf{r}) = \int d^3r_1 d^3r_2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 . \quad (9.31)$$

Одночастичные волновые функции предполагаются нормированными

$$\int d^3r |\psi_1(\mathbf{r})|^2 = \int d^3r |\psi_2(\mathbf{r})|^2 = 1 ; \quad (9.32)$$

и они ортогональны вследствие противоположной чётности

$$\int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r}) = 0 . \quad (9.33)$$

Интегрирование в (9.31) даёт

$$w(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2) , \quad (9.34)$$

поскольку интерференционный член обращается в ноль вследствие ортогональности (9.33). Множитель 1/2 гарантирует правильную нормировку

$$\int d^3r w(\mathbf{r}) = 1 . \quad (9.35)$$

2. Для функций определённой чётности интеграл по верхнему полупространству равен

$$\int_{z \geq 0} d^3 r |\psi_{1,2}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{2}. \quad (9.36)$$

Поэтому вероятность нахождения одной частицы в верхнем полупространстве при произвольном положении другой частицы получается из (9.34):

$$w(z \geq 0) = \int_{z \geq 0} d^3 r w(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2}. \quad (9.37)$$

3. Чтобы найти вероятность нахождения обеих частиц одновременно в верхнем полупространстве, вернёмся к полной волновой функции (9.30):

$$w(z_1 \text{ и } z_2 \geq 0) = \int_{z_1, z_2 \geq 0} d^3 r_1 d^3 r_2 |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2. \quad (9.38)$$

Однако в полупространстве одночастичные волновые функции не обязательно ортогональны, и их перекрытие описывается интегралом

$$I = \int_{z \geq 0} d^3 r \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}). \quad (9.39)$$

Используя формулы (9.36) и (9.39), мы получим

$$w(z_1 \text{ и } z_2 \geq 0) = \frac{1}{4} + |I|^2. \quad (9.40)$$

В случае фермионов волновая функция должна быть антисимметричной по пространственным переменным (спиновые части  $\chi_1$  и  $\chi_2$  волновых функций одинаковы, и поэтому их произведение автоматически симметрично). Пространственная часть дается слэтеровским детерминантом:

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)] \chi_1 \chi_2. \quad (9.41)$$

Вычисления производятся тем же способом, как для бозонов, с учётом того, что спинор  $\chi$  нормирован как  $\langle \chi | \chi \rangle = 1$ . Тогда формулы (9.34) и (9.36) остаются справедливыми. Однако одновременная вероятность (9.40) теперь

равна

$$w(z_1 \text{ и } z_2 \geq 0) = \frac{1}{4} - |I|^2 \quad (9.42)$$

(легко доказать, что это выражение всегда неотрицательно).

Для различимых частиц нет перестановочной симметрии:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2). \quad (9.43)$$

Вероятности найти одну частицу в точке  $\mathbf{r}$  теперь различны для двух частиц:

$$w_1(\mathbf{r}) = |\psi_1(\mathbf{r})|^2, \quad w_2(\mathbf{r}) = |\psi_2(\mathbf{r})|^2. \quad (9.44)$$

Для каждой частицы вероятность найти её в верхнем полупространстве равна  $1/2$ , а их одновременная вероятность быть в верхнем полупространстве равна  $1/4$ . Спиновые переменные, если они есть, не влияют на результат.

Мы видим, что неразличимость частиц приводит к интерференционным явлениям, связанным с интегралом перекрытия (9.39). В случае бозонов это приводит к эффективному притяжению частиц, тогда как фермионы с параллельными спинами ощущают эффективное отталкивание по сравнению со случаем различимых частиц (принцип Паули). Для фермионов с противоположными проекциями спина интерференция отсутствует вследствие ортогональности спиноров, так что они ведут себя как различимые частицы.

### Задача 9.6

Два тождественных бесспиновых бозона массой  $m$  образуют молекулу благодаря потенциалу взаимодействия между ними  $U = \frac{k}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$ . Определите спектр стационарных состояний молекулы.

#### Решение.

Волновая функция движения центра масс симметрична по построению. Волновая функция относительного движения является собственным состоянием гамильтониана

$$H_{\text{отн}} = \frac{\mathbf{p}^2}{m} + \frac{1}{2}k\mathbf{r}^2, \quad (9.45)$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  и  $\mathbf{p}$  — координаты и импульс относительного движения соответственно. Мы также учли приведённую массу  $m/2$ . Энергетический спектр даётся стандартным решением для изотропного гармонического осциллятора, где собственное значение энергии зависит только от главного

квантового числа

$$E(N) = \hbar\omega \left( N + \frac{3}{2} \right), \quad N = n_x + n_y + n_z, \quad \omega = \sqrt{\frac{2k}{m}}. \quad (9.46)$$

В двухчастичной системе перестановочная симметрия пространственной волновой функции эквивалентна чётности. Для осциллятора она совпадает с  $(-)^N$ ; все орбитальные моменты  $\ell$  при заданном  $N$  имеют ту же чётность, что и  $N$ . Только симметричные состояния допустимы для тождественных бозонов. Поэтому разрешённый спектр (9.46) ограничен чётными состояниями

$$N = 0, 2, 4, \dots \quad (9.47)$$

### Задача 9.7

Молекулярный водород  $\text{H}_2$  может существовать в двух формах, пара- и орто-, которые отличаются полным ядерным спином  $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$  двух протонов, образующих молекулу. Ядерный спин равен  $S = 0$  и  $S = 1$  для пара- и ортоводорода соответственно. Обсудите возможные состояния молекулы водорода  $\text{H}_2$  с точки зрения статистики тождественных частиц и допустимых квантовых чисел [56].

### Решение.

Молекулярная волновая функция должна быть антисимметричной относительно перестановки протонов. Электронная и колебательная волновые функции основного состояния симметричны по координатам протонов. Ядерная спиновая функция антисимметрична для параводорода и симметрична для ортоводорода. Правильная полная антисимметрия должна обеспечиваться соответствующей симметрией угловой волновой функции молекулы, симметричной для параводорода и антисимметричной для ортоводорода. Двухатомная молекула имеет вращательный спектр, соответствующий вращению вокруг оси, перпендикулярной к оси молекулы, см. разд. I.5.7. Ориентационная волновая функция — это просто  $Y_{LM}(\mathbf{n})$ , где единичный вектор  $\mathbf{n}$  описывает направление оси молекулы в пространстве. Эта функция приобретает множитель  $(-)^L$  при перестановке протонов (для двухчастичной системы это эквивалентно пространственной инверсии). Поэтому для молекулы параводорода разрешены только состояния с чётными  $L = 0, 2, \dots$ , а для ортоводорода — только с нечётными  $L = 1, 3, \dots$ . Вращательный спектр ортоводорода начинается с  $L = 1$ , что даёт добавочную вращательную энергию по сравнению с основным состоянием

параводорода  $L = 0$ . При комнатной температуре, которая выше, чем интервалы вращательной энергии, газообразный водород является статической смесью этих двух модификаций в отношении орто : пара = 3 : 1, равном отношению чисел магнитных подуровней. При низких температурах все молекулы релаксируют в параводородную фазу. Чтобы сохранить значительную долю ортоводородных молекул при низких температурах, охлаждение должно быть быстрее, чем время релаксации.

### Задача 9.8

Рассмотрите упругое рассеяние нейтрона молекулами пара- и ортоводорода при очень низкой энергии, когда длина волны нейтрона больше, чем среднее расстояние между протонами в молекуле водорода ( $0,75 \text{ \AA}$ ). Покажите, что сравнение этих сечений позволяет определить знак длины  $n$ - $p$ -рассеяния. Исторически этот важный эксперимент (*Р. Саттон и др.*) [57] по определению знаков синглетной  $a_s$  и триплетной  $a_t$  длин рассеяния был произведён по предложению *Дж. Швингера* и *Э. Теллера* [56]. Знак амплитуды рассеяния важен для вопроса о существовании связанных  $n$ - $p$ -состояний (отличных от дейтрона).

### Решение.

Измерение сечения  $n$ - $p$ -рассеяния не даёт информации о знаке  $a$ . Более того, в эксперименте с неполяризованными нейтронами и протонами можно измерить только *усреднённое* значение синглетного и триплетного сечений: для данного столкновения пара может находиться в синглетном состоянии с вероятностью  $1/4$  и в триплетном с вероятностью  $3/4$ . Наблюдаемое сечение равно

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{4}\sigma_s + \frac{3}{4}\sigma_t. \quad (9.48)$$

Вследствие разницы в допустимых вращательных состояниях упругое рассеяние нейтрона различно для пара- и ортоводорода даже без ядерных сил, зависящих от спина. При большой длине волны нейтрон *когерентно* взаимодействует с двумя протонами (ср. разд. 3.9); нужно складывать соответствующие упругие *амплитуды*. Чтобы получить правильный результат для любого спинового состояния, запишем эффективную длину рассеяния для  $n$ - $p$ -взаимодействия как оператор

$$\hat{a} = \frac{1}{2}(1 - \hat{P}^\sigma)a_s + \frac{1}{2}(1 + \hat{P}^\sigma)a_t. \quad (9.49)$$

Здесь  $a_s$  и  $a_t$  — синглетная и триплетная длины  $n$ — $p$ -рассеяния соответственно, а  $\hat{P}^\sigma$  — спиновый обменный оператор (9.24). Комбинации  $\frac{1}{2}(1 \mp \hat{P}^\sigma)$  в (9.49) извлекают из любого состояния его синглетную или триплетную часть. Используя явное выражение для спинового обменного оператора (см. т. 2, формула (7.27)), получаем эффективную длину  $n$ — $p$ -рассеяния в виде оператора, действующего на спиновые переменные

$$\hat{a} = \frac{1}{4} [3a_t + a_s + (a_t - a_s)(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p)]. \quad (9.50)$$

Теперь мы можем применить это к рассеянию молекулой водорода. В пределе очень низких энергий мы пренебрегаем размером молекулы по сравнению с длиной волны нейтрона. Тогда можно просто сложить величины (9.50) для двух протонов и ввести эффективную длину рассеяния, *симметричную* по отношению к протонам:

$$\hat{A} = \hat{a}(1) + \hat{a}(2) = \frac{1}{2} [3a_t + a_s + (a_t - a_s)(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \hat{\mathbf{S}})], \quad (9.51)$$

где  $\mathbf{S}$  — ядерный спин молекулы (9.23). Учитывая разность фаз, возникающую из-за конечного расстояния между протонами в молекуле, мы могли бы получить также члены, *антисимметричные* по спинам протонов. Они ответственны за переходы орто-пара и пара-орто. За упругое рассеяние, как и за пара-пара и орто-орто возбуждения, ответственны симметричные члены.

Упругое рассеяние описывается матричными элементами  $\langle m' M' | \hat{A} | m M \rangle$ , где  $m$ ,  $m'$  и  $M$ ,  $M'$  — начальная и конечная проекции спина для налетающего нейтрона и молекулы соответственно. Наблюдаемое упругое сечение без поляризации нейтрона или молекулярного газа мишени и без измерений конечных поляризаций пропорционально квадрату этого матричного элемента, усредненному по начальным поляризациям и просуммированному по конечным поляризациям,

$$\sigma_{\text{упр}} \propto \frac{1}{2(2S+1)} \sum_{mMm'M'} |\langle m' M' | \hat{A} | m M \rangle|^2. \quad (9.52)$$

Стандартный способ вычисления таких сумм следующий. Сумма по начальным и конечным спиновым состояниям сводится к следу в спиновом пространстве

$$\sum_{fi} |A_{fi}|^2 = \sum_i \left( \sum_f A_{fi}^* A_{fi} \right) = \sum_i (A^\dagger A)_{ii} = \text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{A}). \quad (9.53)$$

Стандартная спиновая алгебра даёт

$$(\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{S}_j \hat{S}_k (\delta_{jk} + i\varepsilon_{jkl}(\sigma_n)_l) = \hat{\mathbf{S}}^2 - (\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \hat{\mathbf{S}}). \quad (9.54)$$

След любой компоненты углового момента равен нулю. В результате мы имеем

$$\text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{A}) = 2(2S + 1) \frac{1}{4} [(3a_t + a_s)^2 + S(S + 1)(a_t - a_s)^2]. \quad (9.55)$$

Чтобы сравнить сечения  $n$ - $p$ - и  $n$ - $\text{H}_2$ -рассеяния, мы должны учесть различные факторы отдачи (приведённые массы),  $m = M/2$  для рассеяния на свободных протонах и  $m = \frac{2}{3}M$  для рассеяния на молекуле. Амплитуда рассеяния пропорциональна приведённой массе, а сечение пропорционально ее квадрату. Для рассеяния нейтрона на протоне, связанном в тяжёлой молекуле, приведённая масса близка к массе нуклона, и сечение было бы в четыре раза больше, чем на свободном протоне. Для двух модификаций молекулы водорода сечения упругого рассеяния нейтрона имеют вид

$$\sigma_{\text{пара}} = 4\pi \left(\frac{4}{3}\right)^2 \frac{1}{4} (3a_t + a_s)^2 = \frac{16\pi}{9} (3a_t + a_s)^2 \quad (9.56)$$

и

$$\sigma_{\text{орто}} = \frac{16\pi}{9} [(3a_t + a_s)^2 + 2(a_t - a_s)^2]. \quad (9.57)$$

Сечение для свободных протонов в тех же обозначениях равно

$$\bar{\sigma} = 4\pi \left(\frac{3}{4}a_t^2 + \frac{1}{4}a_s^2\right) = \frac{\pi}{4} [(3a_t + a_s)^2 + 3(a_t - a_s)^2]. \quad (9.58)$$

Комбинация различных измерений позволяет определить длины рассеяния с их знаками:  $a_t \approx 5,44$  фм,  $a_s \approx -23,72$  фм. Из-за противоположных знаков триплетной и синглетной длин сечение для ортоводорода значительно превышает сечение для параводорода. Взглянув снова на нашу иллюстрацию смысла длины рассеяния на рис. 2.6, мы понимаем, что этот результат согласуется с наличием триплетного связанного состояния (дейтрона) и отсутствием синглетного связанного состояния.

## 9.6. Рассеяние тождественных частиц

В духе примера на рис. 9.1 мы можем рассмотреть процесс рассеяния двух неразличимых частиц. Даже в классической механике мы имеем два случая регистрации продуктов рассеяния одним и тем же детектором,

помещённым (в системе центра масс) под некоторым углом  $\theta$ . В случае I детектор  $D$  регистрирует частицу  $a$ , рассеянную на угол  $\theta$ ; тогда частица  $b$  могла бы быть зарегистрирована дополнительным детектором под углом  $\pi - \theta$ . В случае II частица  $a$  рассеивается на угол  $\pi - \theta$  от оси столкновения, тогда как детектор  $D$  регистрирует вместо неё частицу  $b$ , тождественную частице  $a$ .

Наблюдаемое *классическое* сечение — просто сумма элементарных сечений *прямого* ( $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ ) и *обменного* ( $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}'$ ) процессов:

$$d\sigma_{\text{кл}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = d\sigma(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + d\sigma(-\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (9.59)$$

В случае центрального поля дифференциальное сечение зависит только от угла рассеяния  $\theta$  и (9.59) упрощается до

$$d\sigma_{\text{кл}}(\theta) = d\sigma(\theta) + d\sigma(\pi - \theta), \quad (9.60)$$

так что

$$d\sigma_{\text{кл}}(90^\circ) = 2 d\sigma(90^\circ). \quad (9.61)$$

Чтобы найти правильный рецепт для *квантового* рассеяния, заметим, что правильно (анти-) симметризованная волновая функция двух тождественных частиц в системе центра масс имеет вид

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (1 \pm \hat{\mathcal{P}}_{ab}) \psi(\mathbf{r}; s_a, s_b) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}; s_a, s_b) \pm \psi(-\mathbf{r}; s_b, s_a)], \quad (9.62)$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$  — относительные координаты,  $s_a$  и  $s_b$  — спиновые переменные, а знаки  $+$  и  $-$  относятся к бозонам и фермионам соответственно. В простом случае, когда пространственные и спиновые переменные разделены,  $\psi(\mathbf{r}; s_a, s_b) \rightarrow \psi(\mathbf{r})\chi(s_a, s_b)$ , функция (9.62) может быть записана как

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r})\chi(s_a, s_b) \pm \psi(-\mathbf{r})\chi(s_b, s_a)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\psi_S + \psi_A)(\chi_S + \chi_A) \pm (\psi_S - \psi_A)(\chi_S - \chi_A)], \end{aligned} \quad (9.63)$$

где комбинации с определённой симметрией имеют вид

$$\psi_{S,A} = \frac{1}{2} [\psi(\mathbf{r}) \pm \psi(-\mathbf{r})], \quad \chi_{S,A} = \frac{1}{2} [\chi(s_a, s_b) \pm \chi(s_b, s_a)]. \quad (9.64)$$

Очевидно, что такую (анти-) симметризацию можно провести и для нефакторизованных функций. Формула (9.63) даёт

$$\psi_B(\mathbf{r}; s_a, s_b) = \sqrt{2} (\psi_S \chi_S + \psi_A \chi_A) \quad (9.65)$$

в бозевском случае и

$$\psi_{\Phi}(\mathbf{r}; s_a, s_b) = \sqrt{2}(\psi_{\mathcal{A}}\chi_{\mathcal{S}} + \psi_{\mathcal{S}}\chi_{\mathcal{A}}) \quad (9.66)$$

в фермиевском. Симметрии координатных и спиновых волновых функций всегда дополняют друг друга, обеспечивая правильную полную симметрию.

В упругом рассеянии асимптотический вид пространственной (относительное движение) и спиновой волновой функции даётся выражением

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; s_a, s_b) \sim \left[ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \chi(s_a, s_b), \quad (9.67)$$

где векторы  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{k}' = \mathbf{k}\mathbf{r}/r$  меняют знак при перестановке частиц (переключение между случаями I и II на рис. 9.1). Пространственные функции с определённой симметрией имеют асимптотику

$$\psi_{\mathcal{S},\mathcal{A}} = \frac{1}{2} \left\{ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \pm e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + \frac{e^{ikr}}{r} [f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \pm f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})] \right\}. \quad (9.68)$$

Например, для *бесспиновых бозонов* мы имеем просто  $\chi_{\mathcal{S}} = 1$  и  $\chi_{\mathcal{A}} = 0$ , поэтому формула (9.65) даёт  $\psi_{\mathcal{B}} = \sqrt{2}\psi_{\mathcal{S}}(\mathbf{r})$ . «Приходящая» часть асимптотики волновой функции равна  $(1/\sqrt{2})\{\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})] + \exp[-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]\}$ , что соответствует потоку  $(1/2)\hbar k/m$  в каждой волне,  $\mathbf{k}$  и  $-\mathbf{k}$ . Но нельзя сказать, какая частица движется слева, а какая справа. Рассеянная часть волновой функции равна  $(1/\sqrt{2})(e^{ikr}/r)[f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})]$ , и полный поток частиц, рассеянных в данном направлении, — это сумма потоков, относящихся к обеим частицам,

$$\mathbf{j}_{\text{расс}} \cdot d\mathbf{S} = \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} [f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})] \right|^2 \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{1}{r^2} dS. \quad (9.69)$$

Как и в стандартной теории рассеяния, мы получаем сечение (индекс 0 указывает спин частицы)

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_0}{do} &= |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \\ &= |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + |f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + 2\text{Re}(f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})). \end{aligned} \quad (9.70)$$

В отличие от классического результата (9.59), амплитуды прямого и обменного процессов складываются когерентно, и появляется дополнительный

интерференционный член. В частности, для центрального поля мы имеем

$$\frac{d\sigma_0(\theta)}{d\theta} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}(f^*(\theta)f(\pi - \theta)) \quad (9.71)$$

и

$$\frac{d\sigma_0(90^\circ)}{d\theta} = 4 \left| f\left(\frac{\pi}{2}\right) \right|^2. \quad (9.72)$$

Сечение при  $90^\circ$  больше классического результата (9.60) в два раза.

Для фермионов со спином  $1/2$  спиновая ситуация менее тривиальна, поскольку возможны синглетное ( $S = 0$ ,  $\chi = \chi_A$ ) и триплетные ( $S = 1$ ,  $\chi = \chi_S$ ) спиновые состояния. Соответственно, мы выбираем дополнительные пространственные функции  $\psi_S$  и  $\psi_A$ .

### Задача 9.9

Докажите, что синглетное и триплетное фермионные сечения для взаимодействия, не зависящего от спина, равны

$$\left( \frac{d\sigma_{1/2}}{d\theta} \right)_{S=0} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (9.73)$$

$$\left( \frac{d\sigma_{1/2}}{d\theta} \right)_{S=1} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (9.74)$$

В триплетном случае (9.74) знак интерференционного члена противоположен знаку для бозевского случая, и, в центральном поле, сечение для угла рассеяния  $90^\circ$  обращается в нуль. Формулы (9.70) и (9.73) немедленно показывают, что при разложении по парциальным волнам в этих случаях остаются только чётные  $\ell$ , тогда как в случае (9.74) — только нечётные.

Если при столкновении двух тождественных фермионов все четыре возможные начальные спиновые состояния равновероятны, то наблюдаемое сечение даётся результатом усреднения по спину:

$$\frac{d\sigma_{1/2}}{d\theta} = \frac{1}{4} \left( \frac{d\sigma_{1/2}}{d\theta} \right)_{S=0} + \frac{3}{4} \left( \frac{d\sigma_{1/2}}{d\theta} \right)_{S=1}. \quad (9.75)$$

Используя (9.73) и (9.74), мы получаем

$$\frac{d\sigma_{1/2}}{d\theta} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + |f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 - \text{Re}(f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})). \quad (9.76)$$

Для центрального поля это приводит к предсказанию

$$\frac{d\sigma_{1/2}(90^\circ)}{do} = \left| f\left(\frac{\pi}{2}\right) \right|^2 = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_{\text{кл}}(90^\circ)}{do}. \quad (9.77)$$

Эти результаты позволяют делать заключения о спинах частиц, если силы, например кулоновские, известны.

### Задача 9.10

Покажите, что при столкновении двух *поляризованных* пучков тождественных частиц со спином  $1/2$  сечение равно

$$\frac{d\sigma}{do} = \frac{1}{4}(1 - \cos \gamma) |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + \frac{1}{4}(3 + \cos \gamma) |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (9.78)$$

где  $\gamma$  — угол между направлениями поляризаций пучков. Для неполяризованных пучков среднее значение  $\overline{\cos \gamma} = 0$ , и (9.78) переходит в предыдущие результаты (9.75) и (9.76).

### Задача 9.11

Обобщите результат (9.76) на случай столкновения неполяризованных пучков тождественных частиц со спином  $s$ .

#### Решение.

Подсчитывая число симметричных и антисимметричных по спину состояний, мы получим для целого  $s$

$$\frac{d\sigma_{\text{Б}}}{do} = \frac{s+1}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + \frac{s}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \quad (9.79)$$

и для полуцелого  $s$

$$\frac{d\sigma_{\text{Ф}}}{do} = \frac{s}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + \frac{s+1}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (9.80)$$

Отметим, что *полное сечение* теперь нужно вычислять как

$$\sigma = \frac{1}{2} \int do \frac{d\sigma}{do}, \quad (9.81)$$

чтобы не считать каждый акт рассеяния дважды.

## 9.7. Интерферометрия интенсивностей

Когда две тождественные частицы попадают в два детектора из удалённого протяжённого источника, возникает корреляция, обусловленная тем, что события  $(1, I; 2, II)$ , в которых частица 1 попадает в детектор I, а частица 2 в детектор II, и события  $(1, II; 2, I)$  не различаются приёмным устройством (рис. 9.2).

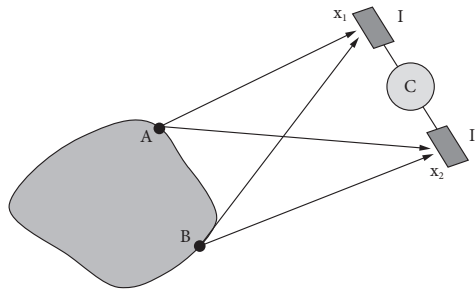


Рис. 9.2. Схема интерферометрии интенсивностей

Этот принцип впервые предложили и практически использовали *Р. Хэнбери Браун и Р. К. Твисс (1954)* для измерения радиусов звёзд с помощью корреляций фотонов [58]. Независимо его применили для тождественных частиц (конкретно пионов), образующихся при распаде адронных резонансов [59]. Ныне этот метод, *ХБТ-интерферометрия*, является одним из главных инструментов для изучения особой фазы горячей ядерной материи, создаваемой при столкновении двух тяжёлых ультрарелятивистских ядер в поисках *кварк-глюонной плазмы*. Столкновение служит источником тысяч испускаемых частиц, которые можно анализировать для каждого события.

Простейший случай соответствует источнику, который состоит только из двух излучателей,  $A$  и  $B$  (см. рис. 9.2). Пара детекторов I и II регистрируют прибытие двух тождественных частиц с 4-импульсами  $k_1(\omega_1, \mathbf{k}_1)$  и  $k_2(\omega_2, \mathbf{k}_2)$ . Волну, распространяющуюся от излучателя  $A$  к детектору I, можно записать как  $\exp[-ik \cdot (x_1 - x_A)]$ , где мы используем четырёхмерные обозначения  $k \cdot x = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ . Каждый акт излучения характеризуется неизвестной фазой  $\alpha_A$  или  $\alpha_B$ . Волна, испущенная излучателем  $A$ , может быть зарегистрирована любым из детекторов, например

$$A(x_A) \rightarrow (k_1) \rightarrow I(x_1) : e^{-ik_1 \cdot (x_1 - x_A) + i\alpha_A} . \quad (9.82)$$

В результате амплитуда вероятности регистрации двух частиц двумя детекторами может быть записана как

$$M(k_1, k_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{-ik_1 \cdot (x_1 - x_A) + i\alpha_A - ik_2 \cdot (x_2 - x_B) + i\alpha_B} \pm e^{-ik_1 \cdot (x_1 - x_B) + i\alpha'_B - ik_2 \cdot (x_2 - x_A) + i\alpha'_A} \right]. \quad (9.83)$$

Здесь мы предусмотрели два возможных типа статистики испущенных частиц и пренебрегли возможностью того, что обе частицы испущены одним и тем же точечным источником.

Вероятность такого скоррелированного события пропорциональна

$$W(k_1, k_2) = |M(k_1, k_2)|^2 = \frac{1}{2} [2 \pm f \pm f^*], \quad (9.84)$$

где

$$f = e^{i(k_2 - k_1) \cdot (x_A - x_B) + i(\alpha'_A - \alpha_A + \alpha'_B - \alpha_B)}. \quad (9.85)$$

Фазы излучения считаются *случайными*, и нужно усреднить  $f + f^*$  по этим фазам. Усреднение приводит к ненулевому результату, только если  $\alpha_A = \alpha'_A$  и  $\alpha_B = \alpha'_B$ . В этом случае *хаотических* источников скоррелированная вероятность сводится к

$$W(k_1, k_2) = 1 \pm \cos((k_2 - k_1) \cdot (x_A - x_B)) \equiv 1 \pm \cos(q \cdot R), \quad (9.86)$$

где  $q = k_1 - k_2$  — относительный 4-импульс двух частиц, а  $R$  характеризует пространственное и временное расстояние между излучателями, т. е. размер и продолжительность действия источника.

Практическое измерение — это по существу счёт числа совпадений между двумя детекторами в единицу времени по сравнению с числом срабатываний одного детектора. Последнее, например для детектора I, определяется амплитудой

$$m(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{-ik(x_1 - x_A) + i\alpha_A} \pm e^{-ik(x_1 - x_B) + i\alpha_B} \right]. \quad (9.87)$$

Соответствующая вероятность равна

$$w(k) = |m(k)|^2 = \frac{1}{2} [2 \pm (f_1 + f_1^*)], \quad f_1 = e^{ik(x_A - x_B) + i(\alpha_A - \alpha_B)}, \quad (9.88)$$

и нормированная корреляционная функция может быть определена как

$$C(k_1, k_2) = \frac{W(k_1, k_2)}{w(k_1)w(k_2)}. \quad (9.89)$$

Чтобы гарантировать статистическую независимость однократно инклюзивных множителей в знаменателе, их можно брать из разных событий. При полной хаотичности источников усреднение независимых фаз  $\alpha_A$  и  $\alpha_B$  даёт  $\overline{f_1} = 0$ . Тогда  $w(k) \rightarrow 1$ , и

$$C(k_1, k_2) = 1 \pm \cos(q \cdot R). \quad (9.90)$$

Здесь мы видим, что интерференция первого порядка амплитуд от разных источников исчезает, но мы всё ещё наблюдаем интерференцию второго порядка, что оправдывает название интерферометрия интенсивностей.

В (9.90) ясно видно различие между двумя типами квантовой статистики. Для полностью хаотических источников мы имеем при  $q \rightarrow 0$

$$C(q \rightarrow 0) = \begin{cases} 2, & \text{бозоны,} \\ 0, & \text{фермионы.} \end{cases} \quad (9.91)$$

Видно бозонное усиление и фермионный провал для тождественных частиц с одинаковыми импульсами,  $k_1 = k_2$ . При больших  $q$  и протяжённом источнике размера  $R \gg 1/q$  усреднение по этому размеру даёт корреляционную функцию, стремящуюся к 1 для обеих статистик.

### Задача 9.12

Рассмотрите источник с пространственно-временной плотностью  $\rho(x)$  и получите аналог корреляционной функции точечных источников (9.90).

#### Решение.

Интегрируя по 4-мерному объёму источника и вводя Фурье-компоненту

$$\rho_q = \int d^4x e^{i(q \cdot x)} \rho(x), \quad (9.92)$$

мы получим

$$C(q) = 1 \pm |\rho_q|^2. \quad (9.93)$$

При более реалистическом рассмотрении источники не полностью хаотичны, и корреляционные функции зависят не только от  $q$ , но и от импульса центра масс двух частиц  $(k_1 + k_2)/2$ .

**Дополнительная литература:** [54], [60], [61], [62], [63], [64]



Стоит потрудиться и изобрести новый символ, если при этом мы не только устраняем некоторые логические трудности, но и обеспечиваем строгость доказательств.

*Ф.Л.Г. Фреге. «Основания арифметики»*

## Глава 10

### Изоспин

#### 10.1. Введение изоспина

Кроме фундаментальных симметрий, связанных с основными свойствами пространства и времени, конкретные взаимодействия обнаруживают дополнительные симметрии, которые, вообще говоря, могут быть *приближёнными*, поскольку нарушаются другими частями гамильтониана. Если нарушения относительно слабы, имеет смысл начинать с идеальной картины, где новая симметрия рассматривается как точная и инвариантные взаимодействия выключены. Это порождает полезную иерархию приближений, способную организовать и упорядочить эмпирические данные.

Основные свойства протона и нейтрона почти одинаковы. Оба они имеют спин  $1/2$  и барионный заряд  $B = 1$ , очень близкие массы, и их *сильные взаимодействия* (ядерные силы) почти одинаковы. Разница в *электромагнитных* свойствах зачастую не слишком существенна, поскольку именно сильные взаимодействия управляют наиболее значимой частью ядерной динамики.

Мы приходим к идее рассматривать *нуклоны* двух сортов как различные состояния одного сильно взаимодействующего объекта. Этот объект имеет теперь внутреннюю степень свободы, которая определяет его проявление как протона или нейтрона. Таким образом, мы имеем «двухуровневую» систему с двумя базисными состояниями:

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (10.1)$$

Состояния (10.1) имеют определённый электрический заряд  $Q_p = 1$  и  $Q_n = 0$  в единицах  $e$ , т. е. они являются собственными состояниями оператора заряда  $\hat{Q}$ . Рассматривая базис (10.1) по аналогии с обычным спином

как  $z$ -представление, можно сказать, что эта «ось квантования» связана со взаимодействием с электромагнитными полями, которое позволяет различать два зарядовых состояния нуклона.

Назовём пространство, охватываемое базисными спинорами (10.1), *зарядовым пространством*. Все операторы в этом пространстве представлены матрицами  $2 \times 2$ , как в случае спинорных состояний частицы со спином  $1/2$ . Мы можем построить полный набор матриц, действующих в этом двумерном пространстве, используя в качестве базиса единичную матрицу и матрицы  $\tau_{1,2,3}$ , определённые в точности так же, как матрицы Паули (II.5.12) в спиновом пространстве. Оператор заряда, очевидно, равен

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 + \tau_3). \quad (10.2)$$

Недиагональные операторы порождают переходы между зарядовыми состояниями нуклона, как это имеет место в бета-распаде и в других слабых процессах. Оператор, увеличивающий заряд, имеет вид

$$\tau_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_+|p\rangle = 0, \quad \tau_+|n\rangle = |p\rangle; \quad (10.3)$$

оператор, понижающий заряд, —

$$\tau_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = (\tau_+)^\dagger, \quad \tau_-|p\rangle = |n\rangle, \quad \tau_-|n\rangle = 0. \quad (10.4)$$

Операторы  $\tau_\pm$  построены из матриц Паули

$$\tau_\pm = \tau_1 \pm i\tau_2 \quad (10.5)$$

тем же способом, как повышающий и понижающий операторы  $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$  любого оператора углового момента. Можно скомбинировать матрицы  $\tau_{1,2,3}$  в матричный «вектор»  $\boldsymbol{\tau}$ , который полностью аналогичен вектору  $\boldsymbol{\sigma}$  спиновых матриц Паули. Однако следует помнить, что ось  $z$  этого пространства фиксирована электрическим зарядом или, в общем случае, электромагнитными взаимодействиями.

Продолжая аналогию со спином, вводим *изоспин* нуклона

$$\hat{\mathbf{t}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\tau}, \quad (10.6)$$

который действует в  $2 \times 2$  зарядовом (изо-) пространстве с естественным базисом (10.1), где базисные состояния имеют определённый заряд, будучи

собственными состояниями оператора

$$\hat{Q} = \frac{1}{2} + \hat{t}_3. \quad (10.7)$$

Правильное полное написание сокращения изоспин — *изобарический* спин, который объединяет состояния *изобар* с тем же самым массовым числом, как, например, протон и нейтрон или ядра с тем же суммарным числом  $A = Z + N$  протонов  $Z = Q$  и нейтронов  $N$ . В ядрах  $A$  совпадает с полным барионным зарядом  $B$  ядер. Неверно расшифровывать термин «изоспин» как *изотопический*, что имеет отношение к *изотопам*, имеющим одинаковый электрический заряд  $Z$ , но разные массы  $A$  (разные изотопы, относящиеся к одному и тому же химическому элементу). Ядра с одинаковым  $N$  и различными  $A$  называются *изотонами*.

На языке изоспина протон и нейтрон являются состояниями с разными проекциями изоспина на ось  $3$  изопространства

$$\hat{t}_3|p\rangle = \frac{1}{2}|p\rangle, \quad \hat{t}_3|n\rangle = -\frac{1}{2}|n\rangle. \quad (10.8)$$

Здесь мы используем соглашение, принятое в физике частиц. В ядерной физике традиционно проекции изоспина определяются противоположным образом —  $-1/2$  для протона и  $+1/2$  для нейтрона. Тогда для стабильных ядер, имеющих, как правило, больше нейтронов, чем протонов, полная проекция изоспина была бы положительной; оператор заряда (10.7) должен быть соответственно переопределён в этом случае как  $(1/2) - \hat{t}_3$ .

## 10.2. Изоспиновая инвариантность

Мы ввели дополнительную степень свободы, связанную с изоспином, без реального увеличения динамического содержания теории. С этой точки зрения мы получили просто другую классификацию возможных состояний. Настоящая физика войдёт в игру с идеей симметрии соответствующего гамильтониана в изоспиновом пространстве.

*Зарядовая симметрия* соответствует преобразованию, обращающему проекцию  $t_3$ :  $p \leftrightarrow n$ . С этой целью можно использовать оператор поворота на угол  $\pi$  относительно оси (2) в изоспиновом пространстве. Мы можем также ввести всевозможные повороты в изопространстве, используя операторы, аналогичные (II.5.17), но построенные из  $\tau$ -матриц вместо  $\sigma$ -матриц. Эти преобразования образуют группу, *изоморфную* группе  $SU(2)$ . Используя базисные состояния (10.1) в качестве строительных кирпичиков, как

мы делали при рассмотрении теоремы Крамерса (разд. II.5.5), мы можем получить мультиплеты (неприводимые представления) с произвольным изоспином в точности, как это было сделано для углового момента, с теми же правилами векторного сложения. Квантовые числа мультиплетов могут приписываться многоуклонным состояниям.

*Зеркальная симметрия* сильных взаимодействий подразумевает инвариантность относительно преобразования зарядовой симметрии. На основании этой симметрии состояния протона и нейтрона должны быть вырождены. Поскольку их электромагнитные свойства различны, это эквивалентно утверждению, что различие их масс обусловлено исключительно электромагнитными взаимодействиями, предположительно на кварковом уровне. Преобразование зарядовой симметрии является частным случаем  $SU(2)$ -преобразований. *Зарядовая независимость* ядерных взаимодействий предполагает, что для данного набора обычных квантовых чисел, относящихся к пространственным и спиновым переменным, ядерные силы одинаковы для любой пары нуклонов —  $pn$ ,  $pp$  или  $np$ . В более широком смысле *изоспиновая инвариантность* предполагает, что гамильтониан сильного взаимодействия инвариантен по отношению ко *всем* элементам изоспиновой группы преобразований. Изоспиновая инвариантность гамильтониана сильного взаимодействия  $\hat{H}_s$  может быть сформулирована как закон сохранения *полного изоспина*  $\hat{\mathbf{T}}$ :

$$[\hat{\mathbf{T}}, \hat{H}_s] = 0, \quad \hat{\mathbf{T}} = \sum_{a=1}^A \hat{\mathbf{t}}_a = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^A \vec{\tau}_a. \quad (10.9)$$

Если это верно, то стационарные состояния ядра должны иметь определённые квантовые числа изоспина и соответствующую симметрию в зарядовом пространстве. Это действительно имеет место, особенно для лёгких ядер, где изоспиновая симметрия явно видна в ядерных спектрах и сечениях реакций, а кулоновские эффекты могут рассматриваться как возмущение. В тяжёлых ядрах с большим зарядом или большим избытком нейтронов сильное электростатическое поле, казалось бы, должно нарушать изоспиновую инвариантность. Однако на самом деле это поле главным образом расщепляет энергии стационарных состояний, но, будучи плавно меняющимся внутри ядер, приводит к относительно умеренному смешиванию уровней с разными изоспинами, делая идею изоспина все еще применимой, хотя и менее полезной практически. Позднее мы вернемся к лежащей в её основе физике и её связи с динамикой обычных (спиновых и пространственных) переменных.

### 10.3. Изоспин системы многих тел

Практическое обобщение понятия изоспина для системы многих тел, такой как атомное ядро, производится непосредственно. В этом случае мы предполагаем полную вращательную инвариантность (10.9) в изоспиновом пространстве, так что стационарным состояниям системы многих тел можно приписать сохраняющееся квантовое число  $T$  полного изоспина, являющееся в изопространстве аналогом полного углового момента и связанное с собственным значением «длины» изоспина  $\mathbf{T}^2 = T(T + 1)$ .

Оператор заряда системы есть естественное обобщение уравнения (10.7)

$$\hat{Q} = \sum_{a=1}^A \left[ \frac{1}{2} + (\hat{t}_3)_a \right] = \hat{T}_3 + \frac{A}{2}. \quad (10.10)$$

Если забыть на минуту об электромагнитных взаимодействиях, которые выделяют ось  $Z$  и нарушают изотропность изопространства, мы можем классифицировать все ядерные состояния *изомультиплетами*. В случае стационарных состояний все  $2T + 1$  состояний мультиплета имеют одну и ту же энергию в пределе точной изоспиновой инвариантности. Кулоновские эффекты расщепляют мультиплеты, хотя принадлежность состояний к одному мультиплету всё ещё очевидна, что является важным спектроскопическим инструментом в ядерной физике. Подчеркнем, что состояния внутри данного изомультиплета принадлежат к *различным* ядрам (общее  $A$ , но различные  $Z$ ). Они часто называются *изобарически аналоговыми* состояниями (ИАС). Закон сохранения (10.9) является, конечно, точным для компоненты  $T_3$ , относящейся к электрическому заряду, уравнение (10.10), поскольку все состояния в данном ядре (*вертикальная шкала*) имеют одинаковую проекцию

$$T_3 = \frac{1}{2} (Z - N) = Z - \frac{A}{2}. \quad (10.11)$$

Но они относятся к разным изомультиплетам (*горизонтальная шкала*).

Так как алгебраические свойства спина и изоспина тождественны, разрешённые значения  $T$  квантованы, будучи целыми (полуцелыми) числами в системе с чётным (нечётным) числом нуклонов. Это порождает вырожденные мультиплеты с заданным  $T$ , которые содержат  $2T + 1$  аналоговых состояний в соседних ядрах с проекциями  $T_3 = -T, \dots, +T$ , или, что эквивалентно, с зарядами (10.10). Если ядро состоит из  $Z$  протонов и  $N = A - Z$  нейтронов, мы имеем  $Q = Z$ ,  $T_3 = -(1/2)(N - Z)$  (обычно в стабильных

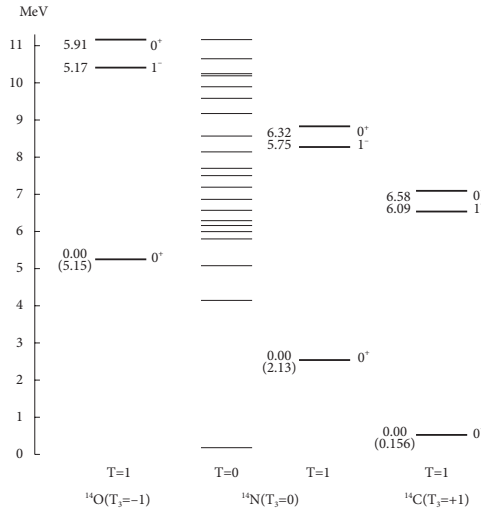


Рис. 10.1. Семейство ядерных изомультиплетов

ядрах  $N \geq Z$ ). Тогда разрешённые значения изоспина ограничены снизу значением проекции

$$T \geq |T_3| = \frac{1}{2}|N - Z|. \tag{10.12}$$

Верхняя граница также очевидна по максимальной проекции изоспина в системе  $A$  нуклонов

$$T \leq \frac{A}{2}. \tag{10.13}$$

Пример семейства ядерных изомультиплетов показан на рис. 10.1.

### Задача 10.1

Сравните ядра  $^{16}_8\text{O}_8$  и  $^{16}_7\text{N}_9$ . Какое из этих ядер имеет большее число возбуждённых состояний?

## 10.4. Изоспин и пространственно-спиновая симметрия

Ядерные силы сильно зависят от пространственной и спиновой симметрий рассматриваемого состояния. Теперь мы покажем, что изоспиновая инвариантность и сохранение изоспина физически эквивалентны утверждению, что в ядерных взаимодействиях *пространственно-спиновая симметрия* волновой функции сохраняется. Мы уже упоминали, что введение изоспина не увеличивает числа степеней свободы ядра или числа возможных

состояний. Это только удобная классификация, связанная с инвариантностью (10.9) сильных взаимодействий. Эта классификация фактически связана с симметрией волновой функции системы многих тел относительно перестановок «обычных» переменных, координат и спинов. Если эффекты нарушения изоспиновой инвариантности, в частности обусловленные электромагнитными взаимодействиями, могут рассматриваться как малые поправки, мы имеем приближенную изоспиновую симметрию.

Построим изоспиновые состояния для двухнуклонной системы. Это можно сделать в полной аналогии со спиновыми состояниями (разд. II.7.3). Для  $A = 2$  можно построить *изотриплет*  $T = 1$  с подуровнями  $T_3 = -1$  (два нейтрона),  $T_3 = 1$  (два протона) и  $T_3 = 0$  (нейтрон и протон), а также *изосинглет*  $T = T_3 = 0$  (нейтрон и протон). Вводя обозначение  $\Omega_{TT_3}$  для изоспиновой волновой функции, мы имеем следующие правильные комбинации  $n - p$ -состояний:

$$\Omega_{11} = |p_1 p_2\rangle, \quad \Omega_{1-1} = |n_1 n_2\rangle, \quad \Omega_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_1 n_2\rangle + |n_1 p_2\rangle), \quad (10.14)$$

$$\Omega_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_1 n_2\rangle - |n_1 p_2\rangle). \quad (10.15)$$

Изотриплетное состояние  $\Omega_{10}$  симметрично по отношению к преобразованию зарядовой симметрии,  $p \leftrightarrow n$ , в то время как изосинглетное состояние  $\Omega_{00}$  антисимметрично. Естественно ввести оператор обмена  $\hat{\mathcal{P}}^\tau$ , который меняет местами зарядовые переменные нуклонов. Его собственные значения в изотриплетном и изосинглетном состояниях равны  $+1$  и  $-1$  соответственно, поэтому по аналогии со спином можно написать

$$\hat{\mathcal{P}}^\tau = \frac{1}{2}[1 + (\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2)] \quad \Rightarrow \quad \mathcal{P}^\tau = (-)^{T+1}. \quad (10.16)$$

Теперь мы можем добавить зарядовые переменные к координатным и спиновым переменным и построить полную двухнуклонную волновую функцию как произведение координатной, спиновой и изоспиновой частей

$$\Phi(1, 2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{SS_z}\Omega_{TT_3}. \quad (10.17)$$

Суть в том, что мы не должны увеличивать число степеней свободы по сравнению с отдельным (протон-нейтрон) описанием. Следовательно, должно существовать правило построения корректных комбинаций пространственно-спиновых и изоспиновых факторов.

Если нуклоны тождественны, пространственно-спиновая часть  $\psi\chi$  антисимметрична в соответствии со статистикой Ферми. Как видно из (10.14), в этом случае изоспиновая часть  $\Omega$  симметрична, а полная волновая функция (10.17) *антисимметрична* по отношению к полной перестановке *всех* переменных  $\mathcal{P}^r\mathcal{P}^\sigma\mathcal{P}^\tau$ . Вследствие изоспиновой инвариантности силы те же самые и для состояния  $\Omega_{10}$  (10.14)  $n - p$ -системы. Следовательно, мы приписываем состояния  $n - p$ -системы, которые антисимметричны в пространственных и спиновых переменных, изоспину  $T = 1$ . У них есть аналоги, содержащие тождественные нуклоны, но полная волновая функция  $\Phi$  всегда антисимметрична. Эти состояния имеют три разные зарядовые формы, что есть признак изоспина  $T = 1$ .

Состояния  $n - p$ , имеющие *симметричную* пространственно-спиновую функцию  $\psi\chi$ , не имеют аналогов, содержащих тождественные нуклоны, и не могут относиться к изотриплету. Нужная изоспиновая функция в этом случае — это  $\Omega_{00}$ , которая антисимметрична по зарядовым переменным. В результате полная функция (10.17) снова *антисимметрична*.

Мы приходим к *обобщённому принципу Паули*: полная двухнуклонная функция антисимметрична по отношению к перестановкам *всех* пространственных, спиновых и изоспиновых переменных. Комбинация операторов обмена позволяет сформулировать это утверждение как правило отбора для физических состояний с правильной статистикой

$$\mathcal{P}^r\mathcal{P}^\sigma\mathcal{P}^\tau = (-)^{\ell+S+1+T+1} = (-)^{\ell+S+T} = -1. \quad (10.18)$$

Возвращаясь к перебору двухнуклонных состояний (разд. 9.5), мы можем теперь добавить квантовое число изоспина. Все состояния, допустимые для тождественных нуклонов, *чётные синглеты и нечётные триплеты*, имеют  $T = 1$ ; все оставшиеся состояния, *нечётные синглеты и чётные триплеты*, включая состояние дейтрона, имеют  $T = 0$

$$\underline{T = 1} : \quad {}^1s_0, \quad {}^3p_{0,1,2}, \quad {}^1d_2, \quad \dots; \quad (10.19)$$

$$\underline{T = 0} : \quad {}^3s_1, \quad {}^1p_1, \quad {}^3d_{1,2,3}, \quad \dots \quad (10.20)$$

### Задача 10.2

Показать, что если ядерные силы инвариантны по отношению к пространственной чётности и изоспину, то спин  $S$  системы из двух нуклонов сохраняется.

#### Решение.

При заданном  $\ell$ , т. е. при заданной чётности, триплеты и синглеты всегда относятся к разным значениям  $T$ . Если нет случайного вырождения, то

стационарное состояние, будучи охарактеризовано определенным изоспином  $T$ , имеет, как следствие, определенный спин  $S$ .

В соответствии с результатом последней задачи вертикального смешивания двухнуклонных состояний (разд. 9.5) не происходит. Горизонтальное смешивание возможно и, более того, имеет место в реальности. Единственное связанное состояние двух нуклонов — это *дейтрон*, тяжёлый изотоп водорода  ${}^2_1\text{H}$ . Такая  $n$ – $p$ -система имеет пространственно-спиновую волновую функцию как суперпозицию состояний  ${}^3s_1$  и  ${}^3d_1$ . Отсутствие  $n$ – $n$ - и  $p$ – $p$ -аналогов подтверждает *изоскалярный*  $T = 0$  характер дейтрона. Можно сказать, что поскольку ядерные силы приводят к единственному связанному состоянию двух нуклонов с такими квантовыми числами, которые не разрешены (см. (10.19)) для  $T = 1$ , существование дейтрона, не имеющего возбуждённых  $n$ – $p$ -аналогов, доказывает отсутствие связанных  $n$ – $n$  или  $p$ – $p$  состояний.

Как теперь ясно из (10.19), сохранение изоспина — это просто сохранение пространственно-спиновой симметрии. Для случая двух нуклонов изоспин и пространственно-спиновая симметрия дополнительны в смысле уравнения (10.18). Однако изоспиновый формализм оказывается исключительно удобным и продуктивным в проблеме многих тел, где свойства симметрии более сложные. Грубо говоря, даже в случае многих тел состояние с максимальным  $T$  имеет больше тождественных нуклонов и, как следствие, меньшую пространственно-спиновую симметрию. Поскольку ядерные силы отвечают притяжению в симметричных пространственно-спиновых состояниях, то основное состояние ядра имеет наименьший разрешённый изоспин, который равен абсолютному значению проекции  $T_{\text{g.s.}} = |T_3| = |N - Z|/2$ .

## 10.5. Беглый взгляд на более общую картину

Как уже упоминалось, вращательная симметрия в обычном пространстве и изоморфная ей изобарическая симметрия в зарядовом пространстве описываются преобразованиями группы  $SU(2)$ . Это группа унитарных матриц  $2 \times 2$  с детерминантом, равным 1. Такие матрицы определяют преобразование элементарных объектов, в нашем случае двухкомпонентных спиноров, соответствующих спину  $1/2$  или изоспину  $1/2$ , образующих *фундаментальное представление* группы  $SU(2)$ . Объекты с высшими значениями спина или изоспина можно построить комбинацией подходящего числа спиноров. Эта конструкция может быть обобщена на высшие симметрии. Основная симметрия КХД, *цветовая симметрия*, описывается группой  $SU(3)$ -преобразований в фундаментальном пространстве цветных *кварков*.

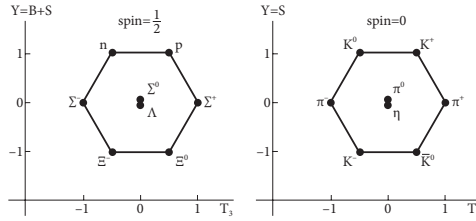


Рис. 10.2. Октет барионов и псевдоскалярных мезонов

*Цвет* вводится как новое квантовое число, которое не следует путать с *ароматом* (характеризующим  $u, d, s$  или более тяжелые кварки). В группе  $SU(2)$  число генераторов равно  $2 \times 2 - 1 = 3$  (независимо от вращений спина). Взаимодействие между кварками требует  $3 \times 3 - 1 = 8$  цветовых состояний для частиц (*глюонов*), изменяющих цвет кварков (мы вычли тождественный оператор). Только «белые» или бесцветные частицы, *синглеты* по отношению к цветовым  $SU(3)$ -преобразованиям, такие как нуклоны (три кварка дополнительных цветов) или мезоны (кварк+антикварк), могут наблюдаться как асимптотически свободные состояния.

В качестве первого шага идея изоспиновой инвариантности может быть естественным образом расширена до *высших* адронных мультиплетов (рис. 10.2). Например, сильные взаимодействия инвариантны при преобразованиях внутри триплета *пионов*  $\pi^{+,0,-}$  с разными электрическими зарядами. Квантовые числа, такие как нулевой спин и отрицательная внутренняя четность, одинаковы для всех пионов. Пионы классифицируются как состояния с изоспином  $T = 1$  и  $T_3 = +1, 0, -1$  соответственно. Электромагнитные эффекты опять приводят к слегка различным массам нейтральных и заряженных пионов и различным временам жизни. Для нейтрального пиона главным каналом распада служит электромагнитный распад на два фотона, что невозможно для заряженных пионов. Распад заряженных пионов происходит значительно медленнее, за счёт слабого взаимодействия, в мюон (более тяжёлый аналог электрона) и соответствующее мюонное нейтрино, например  $\pi^+ \rightarrow \mu^+ \nu_\mu$ , уравнение (8.36).

Конечно, абсолютное сохранение электрического заряда не разрешает существования таких состояний, как суперпозиция протона и нейтрона (так называемое *правило суперотбора*). Однако все члены изомultiплетов с разными электрическими зарядами (10.10) могут существовать при заданном барионном заряде и должны иметь почти тождественные свойства по отношению к ядерным силам. Хотя электромагнитные, прежде всего

кулоновские, эффекты нарушают изоспиновую инвариантность, во многих случаях она реализуется с хорошей точностью, и это даёт возможность для реконструкции гамильтониана сильных взаимодействий.

Для мезонных мультиплетов, таких как *пионный*  $Q = T_3$  (симметрия по отношению к центру мультиплета), зарядовая симметрия сдвигается барионным зарядом  $B$ , так что для нуклонов ( $B = A = 1$ ) и мезонов ( $B = 0$ ) общее правило идентификации членов мультиплета может быть записано как

$$Q = \frac{B}{2} + T_3. \quad (10.21)$$

*Барионный октет* объединяет нуклоны и гипероны, все они фермионы со спином  $1/2$ . Возбуждённые нуклоны, например *гипероны*, имеют дополнительные квантовые числа.  $\Sigma^{+,0,-}$ -гипероны характеризуются (разд. 8.9) *странностью*  $S = -1$  (не путать со спином,  $s = 1/2$  для всех членов октета), а роль барионного заряда в таких соотношениях, как (10.21), теперь играет *гиперзаряд*  $Y = B + S$ . Для нуклонов мы имеем  $S = 0$ ,  $Y = B = 1$ , для  $\Lambda$  и  $\Sigma$  гиперонов  $S = -1$ ,  $Y = 0$ . *Каскадные гипероны*  $\Xi^-$  и  $\Xi^0$  обладают странностью  $S = -2$  и гиперзарядом  $Y = -1$ . В общем определении

$$Q = \frac{Y}{2} + T_3. \quad (10.22)$$

Каоны (снова без барионного заряда  $B = 0$ , следовательно,  $T_3 = Q - S/2$ ) образуют два изодублета,  $(K^0, K^+)$  со странностью  $S = Y = +1$  и  $(K^-, \bar{K}^0)$  с  $S = Y = -1$ . В центральной части добавлен изоскалярный  $\eta$ -мезон,  $T = S = Y = 0$ . Все эти частицы *псевдоскаляры* с нулевым спином и отрицательной чётностью.

Существование семейств, таких как на рис. 10.2, объясняется в *теории кварков*. Фермионы барионного октета имеют три валентных кварка, объединённых в полный спин  $1/2$ ; возможно также присутствие *моря кварк-антикварковых пар*. Концепция изоспиновой  $SU(2)$ -инвариантности обобщается до *высших симметрий* в КХД, где она связана с тем фактом, что два легчайших кварка  $u$  (up) и  $d$  (down) имеют одинаковые массы и взаимодействия. Верхняя линия в барионном октете соответствует нуклонам, построенным только из этих валентных кварков. Каждый шаг вниз заменяет один из этих кварков на странный кварк с  $S = -1$ . Более того, в приближении, когда различием между  $u, d$ -кварками и  $s$  (странным) кварком, носителем странности, пренебрегается, имеется уже три фундаментальных объекта, так что соответствующей группой (приближенной) инвариантности является группа  $SU(3)$ -ароматов, или даже  $SU(6)$ , если

взаимодействия не зависят от спина. Мезонный октет построен из пары валентных кварка и антикварка с полным нулевым спином. Верхняя линия содержит  $u$ - или  $d$ -кварк и  $\bar{s}$ , что соответствует  $S = +1$ . Центральная линия не содержит странных кварков, нижняя имеет  $s$ -кварк и  $\bar{u}$ - или  $\bar{d}$ -антикварк. Семейства более тяжёлых частиц могут быть построены аналогичным образом путём изменения связи кварковых спинов, добавления высших орбитальных моментов и/или более тяжёлых кварков. Здесь мы не можем вдаваться в детали кварковой теории, подчеркивая тем не менее глубину и полезность высших симметрий.

## 10.6. Соотношения между сечениями

Изоспиновая инвариантность ядерных сил, распространённая на все адроны, построенные из  $u$ - и  $d$ -кварков, позволяет предсказать соотношения между сечениями разных реакций с участием частиц, которые относятся к заданным изобарическим мультиплетам. Сравнение реакций должно проводиться при одинаковой энергии в системе центра масс и углах рассеяния и для идентичных спиновых состояний.

В качестве примера рассмотрим реакции, включающие триплет ( $T = 1$ ) пионов  $\pi^{+,0,-}$ . Уже из *зарядовой симметрии*, не принимая полностью во внимание изоспиновую инвариантность, можно сделать некоторые предсказания. Это преобразование инвертирует  $t_3$ , изменяя  $p \leftrightarrow n$ ,  $\pi^+ \leftrightarrow \pi^-$ ,  $\pi^0 \leftrightarrow \pi^0$ . Это немедленно приводит к равенству сечений для образования  $\pi^+$  и  $\pi^-$  в  $np$ -столкновениях:

$$p + n \rightarrow n + n + \pi^+, \quad p + n \rightarrow p + p + \pi^-. \quad (10.23)$$

В более сложных случаях нам нужно полностью использовать изоспиновую инвариантность. Начальное и конечное состояния должны быть представлены как суперпозиции изоспиновых собственных функций  $\Omega_{TT_3}$ .

### Задача 10.3

Предполагая изоспиновую инвариантность, сравните сечения образования пиона и дейтрона в  $np$ - и  $pp$ -столкновениях:

$$(a) \quad n + p \rightarrow \pi^0 + d; \quad (b) \quad p + p \rightarrow \pi^+ + d. \quad (10.24)$$

### Решение.

Поскольку дейтрон имеет  $T = 0$ , в обоих случаях конечное состояние имеет изоспин  $T_f = T_\pi = 1$ . Поэтому реакции, управляемые сильным

взаимодействием, возможны только для начального изоспина  $T_i = 1$ .  $pp$ -система всегда имеет  $T = 1$ , в то время как в соответствии с (10.14) и (10.15)

$$|pn\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Omega_{10} + \Omega_{00}). \quad (10.25)$$

Доля состояния  $T = 1$  здесь равна  $1/2$ . Поскольку при  $T = 1$  обе реакции должны иметь равные амплитуды вследствие изоспиновой инвариантности (конечные состояния представляют различные проекции триплета  $T = 1$ , в то время как физика сильных взаимодействий не зависит от ориентации в изопространстве), мы предсказываем  $\sigma_b = 2\sigma_a$ .

Соотношения между реакциями в данном изоспиновом канале определяются коэффициентами Клебша—Гордана, которые для изоспиновой группы  $SU(2)$  такие же, как и для группы углового момента  $SU(2)$ . В случае (10.25)  $KGC=1/\sqrt{2}$ . Существует простой способ связать различные реакции между членами одного мультиплета, избегая вычисления коэффициентов Клебша—Гордана: так называемая *фабрика Шмушкевича*. В качестве примера рассмотрим все возможные зарядовые каналы для пион-нуклонного рассеяния (без обмена и с обменом зарядов):

	+	0	-	
1) $\pi^+p \rightarrow \pi^+p$	1	0	1	(10.26)
2) $\pi^0p \rightarrow \pi^0p$	0	2	0	
3) $\pi^0p \rightarrow \pi^+n$	1	0	1	
4) $\pi^-p \rightarrow \pi^-p$	1	0	1	
5) $\pi^-p \rightarrow \pi^0n$	0	2	0	
1') $\pi^-n \rightarrow \pi^-n$				
2') $\pi^0n \rightarrow \pi^0n$				
3') $\pi^0n \rightarrow \pi^-p$				
4') $\pi^+n \rightarrow \pi^+n$				
5') $\pi^+n \rightarrow \pi^0p$				

Реакции  $1' - 5'$  являются зарядовыми отражениями реакций  $1-5$  и имеют те же сечения,  $\sigma_i = \sigma_{i'}$ . Теперь мы представим, что все реакции (10.26) происходят одновременно внутри черного ящика, начиная с полностью *изоспин-неполяризованного* состояния, когда все члены нуклонного и пионного мультиплетов представлены одинаково, т. е. все начальные изоспиновые проекции равновероятны. Вследствие изоспиновой инвариантности в зарядовом пространстве нет направления, которое может быть выделено как результат реакций — поэтому состояние будет оставаться изоспин-неполяризованным. Это означает, что заселённость разных мезонных состояний (правая часть таблицы) должна остаться одинаковой. В свою очередь, это возможно, только если сечения удовлетворяют условию

$$\sigma_1 + \sigma_3 + \sigma_4 = 2(\sigma_2 + \sigma_5). \quad (10.27)$$

Вдобавок мы можем вспомнить *принцип детального равновесия* (разд. 4.3), который говорит, что  $\sigma_3 = \sigma_{3'} = \sigma_5$ , и окончательно мы приходим к нетривиальному результату

$$\sigma_2 = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_4 - \sigma_5). \quad (10.28)$$

Из-за быстрого распада  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$  мы не можем на практике осуществить реакции 2 и 3. Тем не менее, мы можем предсказать их сечения в терминах экспериментально наблюдаемых реакций с заряженными пионами.

#### Задача 10.4

Вывести соотношение между сечениями образования пионов в ядерных столкновениях:

$$\sigma(np \rightarrow np\pi^0) + \sigma(pp \rightarrow pp\pi^0) = \sigma(np \rightarrow pp\pi^-) + \frac{1}{2}\sigma(pp \rightarrow pn\pi^0). \quad (10.29)$$

Более детальные результаты могут быть получены при явном использовании коэффициентов Клебша—Гордана применительно к состояниям изоспина. Возьмем в качестве примера пион-нуклонное рассеяние. Система пион + нуклон может иметь  $T = 1/2$  с  $T_3 = \pm 1/2$  и  $T = 3/2$  с  $T_3 = \pm 1/2, \pm 3/2$ . В предположении точной изоспиновой инвариантности ядерных сил  $T$  сохраняется. Следовательно, существуют только две независимые амплитуды  $f_T$  для  $\pi N$  рассеяния,  $f_{1/2}$  и  $f_{3/2}$ .

#### Задача 10.5

Выразить наблюдаемые сечения рассеяния заряженных пионов нуклонами через амплитуды  $f_{1/2}$  и  $f_{3/2}$  рассеяния в состояниях с определенным  $T$ .

#### Решение.

Достаточно рассмотреть только рассеяние пионов на протоне, поскольку рассеяние на нейтроне может быть получено с помощью зарядовой симметрии (в действительности нет чисто нейтронных мишеней, и информация о рассеянии нейтронами может быть извлечена неявно из экспериментов на ядрах, содержащих как протоны, так и нейтроны). Для связи изоспина 1 пионов с нуклонным изоспином  $1/2$  мы используем коэффициенты Клебша—Гордана, найденные в задаче II.7.1 для векторной связи орбитального момента 1 и спина  $1/2$ , и строим пион-нуклонные состояния как правильные

комбинации состояний  $\Omega_{T T_3}$  с определенным изоспином:

$$\begin{aligned}
 |\pi^+ p\rangle &= \Omega_{3/2 3/2}; & |\pi^- n\rangle &= \Omega_{3/2 -3/2}; \\
 |\pi^- p\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{3/2 -1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{1/2 -1/2}; & |\pi^0 n\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{3/2 -1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{1/2 -1/2}; \\
 |\pi^0 p\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{3/2 1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{1/2 1/2}; & |\pi^+ n\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{3/2 1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{1/2 1/2}.
 \end{aligned}
 \tag{10.30}$$

Отсюда мы определим амплитуды перехода (элементы матрицы рассеяния):

$$M(\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p) = \langle \Omega_{3/2 3/2} | \hat{f} | \Omega_{3/2 3/2} \rangle = f_{3/2}; \tag{10.31}$$

$$\begin{aligned}
 &M(\pi^- p \rightarrow \pi^0 n) = \\
 &= \left\langle \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{3/2 -1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{1/2 -1/2} \left| \hat{f} \right| \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{3/2 -1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{1/2 -1/2} \right\rangle = \\
 &= \frac{\sqrt{2}}{3} \left[ \langle \Omega_{3/2 -1/2} | \hat{f} | \Omega_{3/2 -1/2} \rangle - \langle \Omega_{1/2 -1/2} | \hat{f} | \Omega_{1/2 -1/2} \rangle \right] = \frac{\sqrt{2}}{3} (f_{3/2} - f_{1/2});
 \end{aligned}
 \tag{10.32}$$

$$M(\pi^- p \rightarrow \pi^- p) = \frac{1}{3} (f_{3/2} + 2f_{1/2}). \tag{10.33}$$

Сечения пропорциональны  $|M|^2$ .

Эксперименты показывают, что во всех случаях  $\pi N$ -рассеяния наблюдается резко выраженный широкий резонанс с центром при энергии пиона около 190 МэВ. Резонансные сечения относятся как

$$\sigma(\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p) : \sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^0 n) : \sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^- p) = 9 : 2 : 1. \tag{10.34}$$

Это точно то, что должно наблюдаться, если взаимодействие в состоянии  $T = 3/2$  намного сильнее в резонансной области, чем в состоянии  $T = 1/2$ ,  $f_{3/2} \gg f_{1/2}$ . Мы заключаем, что при этой энергии пион-нуклонное взаимодействие осуществляется главным образом через промежуточное состояние с  $T = 3/2$ . При анализе углового распределения рассеянных частиц, было найдено, что угловой момент этого состояния также равен  $J = 3/2$  (« $\mathcal{F}$ -резонанс»). Резонанс может быть описан формулой Брейта–Вигнера с энергией  $E \approx 1236$  МэВ и шириной  $\Gamma \approx 120$  МэВ. Мы видим, что существует квазистационарное состояние, называемое  $\Delta$ -резонансом, или дельта-изобарой, как спин-изоспиновое возбуждение нуклона с кван-

товыми числами  $J = 3/2$  и  $T = 3/2$ . На языке кварков это состояние с параллельными спинами и изоспинами трех кварковых составляющих. В соответствии с изоспиновой инвариантностью должно быть  $2T + 1 = 4$  состояний с проекциями  $T_3 = \pm 1/2, \pm 3/2$  и электрическими зарядами, определенными в соответствии с (10.10) из  $T_3 = Q - B/2 = Q - 1/2$ :

	$\Delta^{++}$	$\Delta^+$	$\Delta^0$	$\Delta^-$	
	$(\pi^+ p)$	$(\pi^0 p), (\pi^+ n)$	$(\pi^0 n), (\pi^- p)$	$(\pi^- n)$	(10.35)
$T_3$	$+3/2$	$+1/2$	$-1/2$	$-3/2$	

### Задача 10.6

Установить изоспин конечного состояния в распаде  $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0$ .

#### Решение.

Этот распад управляется слабыми взаимодействиями и не сохраняет изоспин. Однако пространственная структура *конечного* состояния (спины равны нулю) определяет его изоспин. В двухпионной системе векторная связь разрешает изоспины  $T = 0, 1, 2$ . Действительное значение  $T_3 = +1$  исключает  $T = 0$ . В случае  $T = 1$  волновые функции двух пионов должны быть антисимметричны в зарядовом пространстве, как это следует для векторной связи двух векторов в их векторное произведение, см. разд. II.1.9. Из-за Бозе-статистики пионов (спин 0), рассматриваемых в обобщенном смысле как тождественные частицы в различных зарядовых состояниях, полная волновая функция (пространственная+зарядовая) должна быть симметричной, что требовало бы для  $T = 1$  антисимметричную пространственную волновую функцию. Это эквивалентно отрицательной чётности двухпионного состояния, т. е. нечётному значению орбитального момента  $\ell$ . Однако  $\ell$  должно быть равно нулю вследствие сохранения орбитального момента (спин  $K^+$  равен нулю). Из-за этого противоречия единственная возможность есть  $T = 2$ .

### Задача 10.7

Показать, что для любого изоспин-инвариантного нуклон-нуклонного взаимодействия между сечениями  $n-p$  и  $p-p$  для рассеянии на  $90^\circ$  должно выполняться неравенство

$$\frac{d\sigma_{np}(\pi/2)}{do} \geq \frac{1}{4} \frac{d\sigma_{pp}(\pi/2)}{do}. \quad (10.36)$$

**Решение.**

Имеются две изоспиновые амплитуды:  $T = 1$  для чётных спиновых синглетов и нечётных триплетов и  $T = 0$  для нечётных синглетов и чётных триплетов. Но нечётные состояния не дают вклада при  $90^\circ$ . Для  $p - p$ -рассеяния  $d\sigma_{pp}/do = d\sigma_{T=1}/do$  для любого угла. Для  $n - p$ -случая мы имеем ( $\theta = 90^\circ$ ) спиновые триплеты при  $T = 0$  и спиновые синглеты при  $T = 1$ ; для неполяризованных пучков синглет и триплет входят со своими статистическими весами. Компоненты с  $T = 1$  одинаковы при  $p - p$ -рассеянии и при  $n - p$ -рассеянии, если изоспиновая инвариантность имеет место. Это приводит к неравенству (10.36).

Дополнительная литература: [10], [65], [66], [67]



Философия написана в этой великой книге — Вселенной, которая остается непрерывно открытой нашему взору. Но книга не может быть понята, пока вначале не научишься понимать язык и читать буквы, из которых она составлена. Она написана на языке математики. . .  
*Г. Галилей — Естествоиспытатель* (цит. по: *С. Дрейк. «Открытия и воззрения Галилея»*)

## Глава 11

### Вторичное квантование

#### 11.1. Представление чисел заполнения

В гл. 9 мы рассмотрели общие свойства проблемы многих тел в квантовой механике и квантовой статистике. Неразличимость тождественных частиц предполагает квантовую интерференцию между различными путями, ведущими к одному конечному состоянию. Эта интерференция — статистическое или даже кинематическое явление, которое проявляется безотносительно к взаимодействию между частицами. Возникающая перестановочная симметрия разрешает только два класса волновых функций — полностью симметричные и полностью антисимметричные по отношению к любой перестановке всех квантовых чисел двух тождественных частиц. Соответственно, мы имеем два типа возможных статистик и два сорта частиц — бозоны и фермионы.

Волновые функции симметричны при перестановках бозонных переменных и антисимметричны при перестановках фермионных. Для любого состояния различимых частиц можно получить его аналог для тождественных частиц, делая симметризацию или антисимметризацию исходной функции. (Конечно, попытка симметризовать функцию, которая уже антисимметрична, приведет к нулевому итогу.) Результатом является, например, детерминант Слэтера для невзаимодействующей Ферми-системы. Его аналог для Бозе-системы, «перманент», образован как детерминант, но со всеми членами, входящими со знаком +. С ростом числа частиц работать с

такими волновыми функциями в обычном координатном (или импульсном) представлении становится всё более сложной задачей.

Другой важный момент состоит в том, что во многих случаях мы имеем дело с ситуациями, когда число частиц не фиксировано. Чтобы описать процессы с *переменным числом частиц*, нужно обобщить концепцию квантовомеханического пространства Гильберта. Гильбертово пространство для заданного числа частиц является только сектором в более обширном *пространстве Фока*, которое включает секторы с различными числами частиц всех типов. Это становится абсолютно необходимым в релятивистской квантовой теории, где число частиц до известной степени зависит от рассматриваемого масштаба. Следовательно, разработать формализм, который мог бы автоматически учитывать симметрию состояний в соответствии с типом статистики и в то же время позволять рассматривать процессы с переменным числом частиц, крайне необходимо.

Простейший способ состоит в том, чтобы использовать *представление чисел заполнения*. Пусть  $|\lambda\rangle$  произвольный полный набор *одночастичных* состояний, характеризующихся квантовыми числами  $(\lambda)$ , например  $(\mathbf{p}\sigma)$  для электронов, описываемых импульсом  $\mathbf{p}$  и проекцией спина  $\sigma$ . На этой стадии нам не нужно знать гамильтониан, управляющий динамикой. Мы используем только *полноту* множества  $|\lambda\rangle$ . Мы предполагаем, что состояния  $|\lambda\rangle$  ортонормированы

$$(\lambda|\lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (11.1)$$

хотя это ограничение можно убрать, работая с неортогональными наборами. Символ Кронекера в (11.1), как обычно, должен пониматься как  $\delta$ -функция Дирака для непрерывных квантовых чисел  $\lambda$ . Конечно, на практике некоторые множества  $|\lambda\rangle$  могут быть более удобными, чем другие. Иногда, особенно в приложении к конечным системам (атомы, молекулы, ядра), состояния  $|\lambda\rangle$  будут называться орбитами, или *орбиталями*.

Теперь мы можем построить состояния *многих частиц*

$$|\{n_\lambda\}\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_\lambda, \dots\rangle, \quad (11.2)$$

вводя множество *целочисленных*  $n_\lambda$ , которые показывают, сколько частиц находится на каждой орбите  $|\lambda\rangle$ . Мы предполагаем, что орбиты  $|\lambda\rangle$  *упорядочены* каким-то (произвольным) способом, и они всегда появляются в таком порядке в описании многочастичных состояний (11.2). Чтобы провести различие между состояниями одной частицы и многих тел, мы используем круглые скобки в определении для первых (позже также и для двухчастичных состояний) и угловые скобки для последних. Числа  $n_\lambda$

являются *числами заполнения* в данном базисе  $|\lambda\rangle$ . В соответствии с типом статистики, они могут быть лишь 0 и 1 для Ферми-статистики и произвольными неотрицательными целыми числами для Бозе-статистики. Нам нужен формализм, который бы удовлетворял этим требованиям автоматически.

Мы включим в рассмотрение все состояния с различными полными числами частиц

$$N = \sum_{\lambda} n_{\lambda}. \quad (11.3)$$

Это означает, что мы работаем в пространстве Фока. С числами заполнения, выбранными в соответствии с типом статистики, бесконечное множество состояний системы многих тел (11.2) является полным в пространстве Фока. Вследствие тождественности частиц нам не нужно указывать, какие частицы занимают орбиту  $|1\rangle$ , какие занимают орбиту  $|2\rangle$  и так далее. Поскольку все свойства одночастичных орбит известны, представление чисел заполнения содержит полную информацию. В самом деле, любое состояние многих тел может быть разложено по полному множеству (11.2) состояний с определёнными числами заполнения, и тогда мы можем ответить на любой вопрос, относящийся к распределению координат, импульсов, вероятностей перехода или какой-либо иной. В произвольном состоянии системы многих тел, выраженном как суперпозиция состояний (11.2), *средние значения* чисел заполнения орбиталей, вообще говоря, не являются целыми.

## 11.2. Введение во вторичное квантование

Единственные переменные в представлении чисел заполнения, основанном на орбитальном базисе  $|\lambda\rangle$ , — это целые  $n_{\lambda}$ , и квантовые операторы должны быть определены как действующие на эти «координаты». Простой пример того, как это можно сделать, дан ниже.

Рассмотрим систему *независимодействующих* частиц, где гамильтониан является суммой независимых одночастичных гамильтонианов:

$$\hat{H} = \sum_a \hat{\epsilon}(a). \quad (11.4)$$

Здесь суммирование производится по частицам, и мы не задаем их число, поскольку в каждом *секторе* пространства Фока с заданным значением  $N$  гамильтониан имеет вид (11.4). Фактически он может иметь тот же вид и для различных частиц.

Если частицы тождественны, то все операторы  $\hat{\varepsilon}$  одинаковы. Выбирая орбиты  $|\lambda\rangle$  как собственные функции одночастичного гамильтониана  $\hat{\varepsilon}$

$$\hat{\varepsilon}|\lambda\rangle = \varepsilon_\lambda|\lambda\rangle, \quad (11.5)$$

найдем полную энергию многочастичного состояния (11.2)

$$E = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda n_\lambda. \quad (11.6)$$

Другими словами, состояние многих тел является собственным состоянием полного гамильтониана, выраженного, вместо уравнения (11.4), в терминах операторов  $\hat{N}_\lambda$  чисел заполнения с целочисленными собственными значениями  $n_\lambda$ :

$$\hat{N}_\lambda|\{n_\lambda\}\rangle = n_\lambda|\{n_\lambda\}\rangle, \quad \hat{H}|\{n_\lambda\}\rangle = E|\{n_\lambda\}\rangle. \quad (11.7)$$

Это как раз то, что мы хотим: оператор, действующий на числа заполнения. В этом случае операторы (11.7) *диагональны*, они не изменяют чисел  $n_\lambda$ . Например, для свободного движения, когда  $\lambda \rightarrow (\mathbf{p}, \sigma)$ , гамильтониан — это просто кинетическая энергия, а полная энергия является суммой индивидуальных кинетических энергий занятых «орбиталей» (в этом случае плоских волн).

Если бы мы взяли другой базис  $|\nu\rangle$  в качестве нашего множества одночастичных орбит, оператор  $\hat{\varepsilon}$ , вообще говоря, не был бы диагональным:

$$\hat{\varepsilon}|\nu\rangle = \sum_{\nu'} \varepsilon_{\nu'\nu}|\nu'\rangle. \quad (11.8)$$

Если мы возьмем частицу на орбите  $|\nu\rangle$ , действие  $\hat{\varepsilon}$  переносит эту частицу на другую орбиту  $|\nu'\rangle$  с амплитудой переноса, заданной матричными элементами  $\varepsilon_{\nu'\nu}$  оператора  $\hat{\varepsilon}$  в этом базисе. Таким образом, в новом базисе оператор  $\hat{\varepsilon}$  более не диагонален. Например, в стандартном представлении приближения сильной связи электронов в кристалле, базисными состояниями являются локализованные орбиты, в то время как кинетическая энергия действует как оператор сдвига, перемещающий частицы с одного узла на другой. В этом случае базис делокализованных блоховских волн диагонализует кинетическую энергию.

Полный гамильтониан  $\hat{H}$  в пространстве Фока также не диагонален в базисе системы многих тел  $|\{n_\nu\}\rangle$ , построенном аналогично (11.2), но с использованием других орбит  $|\nu\rangle$  вместо  $|\lambda\rangle$ . Однако он всё ещё *блок-*

*диагональный* по отношению к секторам пространства Фока, если он сохраняет число частиц. Отметим, что гамильтониан невзаимодействующей системы (11.4) содержит только члены, которые могут менять орбиту не более чем одной частицы: это *одночастичный оператор*.

Проблема работы в базисе, где гамильтониан не диагонален, связана с тем, что исходное «физическое» состояние (11.2), будучи разложено по полному множеству состояний  $\{|n_\nu\rangle\}$ , оказывается их суперпозицией с *нецелыми* средними числами заполнения. В исходном базисе  $|\lambda\rangle$  мы имеем целые числа заполнения. Но произвольная орбита  $|\lambda\rangle$  является суперпозицией орбит  $|\nu\rangle$ . Даже для одной частицы в состоянии  $|\lambda\rangle$  орбиты  $|\nu\rangle$  заполнены с дробными вероятностями. Вычисляя переход под действием некоторого оператора, следует учитывать эти вероятности, поскольку они полностью определяют результат. Например, если состояние фермиона уже заполнено на 90 %, то другой фермион не может занять эту орбиту с той же легкостью, как это могло бы быть для пустого состояния. Нам нужно перевести все операторы в представление чисел заполнения таким образом, чтобы результат их действия правильно отражал существующую занятость орбит. Кроме того, нам нужно не только перемещать частицы между орбитами, но также менять их полное число, создавая и уничтожая частицы (переход *между секторами* в пространстве Фока).

Подходящим инструментом являются *операторы рождения и уничтожения*. Мы уже имели подобный опыт: для осцилляторных квантов этот аппарат обсуждался детально в связи с алгеброй Гейзенберга–Вейля (разд. I.11.8); он был обобщён для многофотонных мод электромагнитного поля в разд. II.13.3. Интерпретируя различные состояния поля как имеющие различное число квантов, мы могли генерировать произвольное полное их число. Вследствие неразличимости кванты гармонического осциллятора, так же как фотоны, являются бозонами, и это то, с чего мы начинаем. Но аналогичное описание возможно также для фермионов.

### 11.3. Статистика Бозе

Операторы рождения и уничтожения позволяют работать в представлении чисел заполнения, где состояния характеризуются числом квантов в разных модах. В системе многих тождественных частиц аналог подобного подхода называется *вторичным квантованием*. Для наших целей достаточно понимать это как математический переход от представления, где базисные векторы являются обычными волновыми функциями Шрёдингера  $\Psi(1, 2, \dots, N)$  с числовыми аргументами, включающими все одночастичные

переменные, к базису состояния системы многих тел (уравнение (11.2) в представлении чисел заполнения, которое использует определённый одночастичный базис  $|\lambda\rangle$ ). Только в релятивистской теории поля вторичное квантование приобретает более глубокое значение.

Процедура вторичного квантования зависит от типа статистики частиц. Для бозонов формализм практически совпадает с тем, что мы использовали для осцилляторов. Мы определяем одночастичный базис  $|\lambda\rangle$  и строим состояния (11.2) со всеми возможными числами заполнения  $n_\lambda$ , которые в случае Бозе могут быть произвольными неотрицательными целыми. Базис системы многих тел  $\{|n_\lambda\rangle\}$  нестационарен во взаимодействующей системе, но он полон и правильно учитывает перестановочную симметрию.

Для каждого одночастичного состояния  $|\lambda\rangle$  мы вводим операторы уничтожения  $\hat{a}_\lambda$  и рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , которые действуют на числа заполнения аналогично тому, что мы использовали для гармонического осциллятора:

$$\begin{aligned}\hat{a}_\lambda|\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= \sqrt{n_\lambda}|\dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_\lambda^\dagger|\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= \sqrt{n_\lambda + 1}|\dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle.\end{aligned}\quad (11.9)$$

В этих уравнениях числа заполнения  $n_{\lambda'}$  всех орбит с  $\lambda' \neq \lambda$  не меняются. Мы также определим операторы чисел заполнения (11.7)

$$\hat{N}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda \quad (11.10)$$

для каждой орбиты  $|\lambda\rangle$ . Числа  $n_\lambda$  в определении состояний (11.2) являются собственными значениями операторов (11.10). В этом случае мы воспроизведём все требуемые операторные соотношения, включая правила коммутации, аналогично (I.11.108) и (I.11.113).

Примем, что операторы для *различных* мод  $\lambda$  коммутируют друг с другом. Тогда полная алгебра операторов может быть записана как

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}] = [\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (11.11)$$

Операторы чисел заполнения (11.10) удовлетворяют лестничной структуре, и их собственные значения — неотрицательные целые. Полное число частиц не фиксировано, и пространство Фока покрывается целиком со всеми возможными значениями полного оператора числа частиц

$$\hat{N} = \sum_{\lambda} \hat{N}_\lambda. \quad (11.12)$$

Подобно (I.11.121), нормированный вектор состояния может быть построен явно путём рождения частиц из вакуумного состояния  $|0\rangle \equiv |\{n_\lambda = 0\}\rangle$ :

$$|\{n_\lambda\}\rangle = \prod_\lambda \frac{1}{\sqrt{n_\lambda!}} (\hat{a}_\lambda^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle. \quad (11.13)$$

Все операторы уничтожения, действуя на вакуумное состояние, дают нуль. В силу коммутаторов (11.11) все операторы рождения (11.13) перестановочны. Это означает, что волновая функция симметрична по отношению к перестановкам, как это и должно быть для Бозе-статистики.

## 11.4. Ферми-статистика

Здесь возможные числа заполнения  $n_\lambda$  могут быть только 0 и 1. Чтобы удовлетворить этому требованию, мы введём взаимно сопряжённые операторы уничтожения  $\hat{a}_\lambda$  и рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , постулируя для них вместо (11.11) *антикоммутационные* соотношения  $[\hat{a}, \hat{b}]_+ \equiv \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$ :

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}]_+ = [\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger]_+ = 0, \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger]_+ = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (11.14)$$

Величины, удовлетворяющие алгебре (11.14), называются *переменными Грассмана*.

Первые два равенства (11.14) дают для  $\lambda = \lambda'$

$$\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda^\dagger = 0, \quad \hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda = 0. \quad (11.15)$$

Это гарантирует *принцип Паули*: размещение двух тождественных фермионов на одной орбите запрещено. Определяя операторы чисел заполнения для каждой орбиты тем же способом (11.10), как для бозонов, и используя последний антикоммутатор в (11.14), мы получим

$$\hat{N}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda, \quad 1 - \hat{N}_\lambda = \hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger. \quad (11.16)$$

Простая алгебра тогда приводит к

$$\hat{N}_\lambda^2 = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger (1 - \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda) \hat{a}_\lambda \quad (11.17)$$

или, используя (11.15),

$$\hat{N}_\lambda^2 = \hat{N}_\lambda. \quad (11.18)$$

Отсюда собственные значения операторов чисел заполнения равны 0 и 1, как и должно быть для Ферми-статистики.

Вектор состояния для системы многих тел может быть построен как в уравнении (11.13); это состояние автоматически зануляется, если  $n_\lambda > 1$ . Любая перестановка операторов рождения изменяет общий знак вектора состояния вследствие антикоммутативности. Следовательно, волновая функция имеет правильную перестановочную симметрию. Фактически вектор состояния (11.13) в случае Ферми строится просто произведением операторов рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  для всех занятых орбит ( $n_\lambda = 1$ ). Это состояние антисимметрично и, следовательно, соответствует детерминанту Слэтера в «первичном квантовании».

Следует упомянуть одну тонкую вещь. Мы упоминали при определении состояния системы многих тел (11.2), что множество одночастичных орбит  $|\lambda\rangle$  должно быть некоторым образом *упорядочено*. Это было неважно для случая Бозе из-за симметрии операторов. Но в антисимметричном фермиевском случае это становится актуальным для матричных элементов операторов рождения и уничтожения в отличие от (11.9). Легко понять на простых примерах, что матричные элементы должны быть равны

$$\begin{aligned}\hat{a}_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= (-)^{\varphi_\lambda} \sqrt{n_\lambda} |\dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_\lambda^\dagger |\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= (-)^{\varphi_\lambda} \sqrt{1 - n_\lambda} |\dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle,\end{aligned}\quad (11.19)$$

где квадратные корни отражают ограничения принципа Паули, а фаза

$$\varphi_\lambda = \sum_{\lambda' < \lambda} n_{\lambda'} \quad (11.20)$$

определяется числом перестановок, которые необходимы для того, чтобы перевести внешний оператор  $\hat{a}_\lambda$  или  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  в его естественное место в упорядоченной последовательности орбит. Вакуумное состояние удовлетворяет (I.11.112), как в Бозе-случае.

### 11.5. Алгебраические соотношения

Все операторы могут быть представлены как состоящие из простейших блоков  $\hat{a}_\lambda$ ,  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  или  $\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}$  (уничтожение, рождение или перемещение частицы). Ниже мы даем несколько тождеств, чтобы их использовать в практических вычислениях с операторами вторичного квантования. Тождества выводятся непосредственным применением элементарных правил, таких как

(11.11) и (11.14). Некоторые результаты справедливы для обоих типов статистики. В других случаях верхний (нижний) знак относится к бозонам (фермионам).

### Задача 11.1

Используя цифровые обозначения для орбит, доказать правила коммутации для парных операторных блоков

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3] = \delta_{12} \hat{a}_3, \quad [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3] = -\delta_{13} \hat{a}_2^\dagger, \quad (11.21)$$

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3^\dagger] = \delta_{12} \hat{a}_3^\dagger \pm \delta_{13} \hat{a}_2^\dagger, \quad (11.22)$$

$$[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4] = \delta_{23} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_4 - \delta_{14} \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2 \quad (11.23)$$

и для важных в приложениях операторов рождения и уничтожения пар,

$$[\hat{a}_1 \hat{a}_2, \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4^\dagger] = \delta_{23} \delta_{14} \pm \delta_{24} \delta_{13} + \delta_{24} \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \delta_{13} \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_2 \pm \delta_{23} \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_1 \pm \delta_{14} \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2. \quad (11.24)$$

Знаки легко понять в соответствии с симметрией или антисимметрией исходных операторов при перестановках. Отметим, что во всех случаях здесь мы вычисляем *коммутаторы*, а не антикоммутаторы.

Для вычисления матричных элементов операторов между состояниями системы многих тел (11.13) достаточно вставить необходимый оператор между бра- и кет-состояниями и вычислить итоговые *вакуумные средние значения*. Они не равны нулю, только если число операторов рождения равно числу операторов уничтожения. Вследствие условия (I.11.112) вакуумные средние равны нулю, если операторы приведены к *нормальной форме* со всеми операторами рождения слева от всех операторов уничтожения. Для произвольной начальной последовательности операторов в исходном матричном элементе, нужно привести их к нормальной форме с помощью коммутаторов или антикоммутаторов. Результат состоит только из  $\delta$ -символов, образованных в этом процессе. Например,

$$\langle 0 | \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger | 0 \rangle = \delta_{12}, \quad (11.25)$$

$$\langle 0 | \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4^\dagger | 0 \rangle = \delta_{23} \delta_{14} \pm \delta_{24} \delta_{13}. \quad (11.26)$$

Рецепт для произвольного вакуумного среднего ясен. Вы начинаете с вакуума справа и должны вернуться к вакууму слева. По пути любой оператор рождения должен аннигилироваться оператором уничтожения. Необходимо провести все разбиения начального операторного выражения на пары  $\hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger$  (в таком *антинормальном* порядке!), написать  $\delta_{12}$  для каждой

пары (*свертка*) и взять сумму вкладов (продуктов свертывания) от всех разбиений. Конечный знак каждого вклада будет + для бозонов, в то время как для фермионов он определяется чётностью перестановки, которая приводит партнеров данной свертки друг к другу. Это так называемая *теорема Вика*. Например, для тождественных бозонов очевидный результат следует немедленно из (I.11.121):

$$\langle 0 | \hat{a}^k (\hat{a}^\dagger)^k | 0 \rangle = k!, \quad (11.27)$$

что соответствует комбинаторному подсчету всех парных сверток.

## 11.6. Одночастичные операторы

Чтобы применить разработанный формализм к физическим задачам, нам нужно выразить *все операторы наблюдаемых* в форме вторичного квантования. Полезно напомнить, что исходный одночастичный базис  $|\lambda\rangle$  достаточно произволен. Всегда можно произвести унитарное преобразование, как в (11.8), для перехода к другому полному набору орбит  $|\nu\rangle$

$$|\lambda\rangle \rightarrow |\nu\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle (\lambda|\nu). \quad (11.28)$$

Унитарная матрица  $(\lambda|\nu) = (\nu|\lambda)^*$  преобразует операторы рождения и уничтожения  $\hat{a}_\lambda \rightarrow \hat{a}_\nu$ ,  $\hat{a}_\lambda^\dagger \rightarrow \hat{a}_\nu^\dagger$ . Новые операторы должны иметь те же свойства, поэтому преобразование должно быть *каноническим*, сохраняющим коммутационные соотношения.

Новые базисные состояния  $|\nu\rangle$  являются ничем иным, как состояниями  $\hat{a}_\nu^\dagger|0\rangle$  с одной частицей поверх вакуумного фона. Это означает, что операторы рождения преобразуются так же, как в уравнении (11.28):

$$\hat{a}_\nu^\dagger = \sum_{\lambda} (\lambda|\nu) \hat{a}_\lambda^\dagger. \quad (11.29)$$

Оператор уничтожения преобразуется в соответствии с сопряженным уравнением

$$\hat{a}_\nu = \sum_{\lambda} (\nu|\lambda) \hat{a}_\lambda, \quad (11.30)$$

и коммутатор (или антикоммутатор) сохраняется

$$[\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}^\dagger]_{\mp} = \sum_{\lambda\lambda'} (\nu|\lambda)(\lambda'|\nu')[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger]_{\mp} = \sum_{\lambda} (\nu|\lambda)(\lambda|\nu') = \delta_{\nu\nu'}. \quad (11.31)$$

Здесь мы использовали полноту набора  $|\lambda\rangle$

$$\sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda| = 1. \quad (11.32)$$

В случае одночастичных переменных с непрерывным спектром  $\delta$ -символы во всех коммутационных соотношениях должны быть заменены на  $\delta$ -функции.

Рассмотрим вначале оператор *одночастичного* типа  $\hat{Q}^{(1)}$  (как в (11.4)), который задан суммой вкладов  $\hat{q}_a$  всех тождественных частиц. Мы можем взять множество  $|q\rangle$  собственных состояний одночастичного оператора  $\hat{q}$

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle \quad (11.33)$$

в качестве нового одночастичного базиса  $|\nu\rangle$  (11.28). В этом базисе форма оператора вторичного квантования  $\hat{Q}^{(1)}$ , действующего в пространстве Фока, очевидна: его собственное значение дается суммой по всем орбитам  $|q\rangle$  вкладов, равных собственному значению  $q$  для заданной орбиты, умноженному на число заполнения  $n_q$ . Это собственное значение оператора:

$$\hat{Q}^{(1)} = \sum_q q \hat{N}_q = \sum_q q \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q. \quad (11.34)$$

Теперь мы используем закон преобразования (11.29, 11.30), чтобы найти вид  $\hat{Q}^{(1)}$  для произвольно выбранного базиса  $|\lambda\rangle$ :

$$\hat{Q}^{(1)} = \sum_{q\lambda\lambda'} q(\lambda|q) \hat{a}_\lambda^\dagger(q|\lambda') \hat{a}_{\lambda'} = \sum_{\lambda\lambda'} \left( \sum_q (\lambda|q) q (q|\lambda') \right) \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}. \quad (11.35)$$

Поскольку сумма в (11.35) равна матричному элементу оператора  $\hat{q}$ ,

$$\sum_q (\lambda|q) q (q|\lambda') = (\lambda|\hat{q}|\lambda'), \quad (11.36)$$

то мы приходим к общему выражению для произвольного одночастичного оператора в форме, инвариантной при унитарных преобразованиях базиса:

$$\hat{Q}^{(1)} = \sum_{12} (1|q|2)\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2. \quad (11.37)$$

Теперь оператор представлен суммой членов, перемещающих одну частицу с орбиты  $|2\rangle$  на орбиту  $|1\rangle$ ; амплитуда перехода равна одночастичному матричному элементу  $(1|q|2)$ .

Важный пример даётся *операторами плотности*

$$\hat{\rho}(q) = \sum_a \delta(q - \hat{q}_a), \quad (11.38)$$

которые определяют амплитуду вероятности данного значения  $q$  для одночастичной переменной  $\hat{q}$  в системе тождественных частиц. В частном случае оператора координаты  $q \rightarrow \mathbf{r}$  — это обычная пространственная плотность, которая появляется в уравнении непрерывности. По своему смыслу оператор (11.38) совпадает с  $\hat{N}_q$ , использованным в (11.34). Вторично квантованная форма оператора плотности является, следовательно, тривиальной в собственном базисе  $|q\rangle$  оператора  $\hat{q}$ , но более сложной в произвольном базисе

$$\hat{\rho}(q) = \hat{N}_q = \hat{a}_q^\dagger\hat{a}_q = \sum_{\lambda\lambda'} (q|\lambda)^*(q|\lambda')\hat{a}_\lambda^\dagger\hat{a}_{\lambda'}. \quad (11.39)$$

Часто имеют дело с координатным и импульсным представлениями, где соответствующие операторы рождения  $\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger$  и  $\hat{a}_\mathbf{p}^\dagger$ ; спин и другие внутренние характеристики могут быть добавлены к  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{p}$  при необходимости. (В координатном представлении часто используется обозначение  $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$  вместо  $\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger$ .) Если координатные плоско-волновые функции (I.3.95) нормированы в конечном объеме  $V$ , соотношение между представлениями даётся выражением

$$\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\hat{a}_\mathbf{p}^\dagger, \quad \hat{a}_\mathbf{p}^\dagger = \int d^3r e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger. \quad (11.40)$$

В частности, оператор пространственной плотности (I.7.144) равен

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) \equiv \hat{N}_\mathbf{r} = \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger\hat{a}_\mathbf{r} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}}\hat{a}_\mathbf{p}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{p}'}. \quad (11.41)$$

Оператор, диагональный в координатном представлении, сильно отличается от диагонального в импульсном представлении.

### Задача 11.2

Для основного состояния идеального Бозе-газа ( $N$  частиц в ящике объемом  $V$ ) найти среднее число частиц в объеме  $v < V$ , среднеквадратичную флуктуацию этого числа и корреляционную функцию плотности (11.41) в разных точках.

### Решение.

Беря среднюю плотность как среднее значение для основного состояния  $|\Psi_0(N)\rangle$  (9.10), мы придём к тривиальному результату:

$$\langle \hat{N}_{\mathbf{r}} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}0} N = \frac{N}{V} \equiv n, \quad (11.42)$$

который не зависит от координаты  $\mathbf{r}$  внутри объема. Среднее число частиц в меньшем объеме  $v$  равно

$$\langle \hat{N}(v) \rangle = \int_v d^3r \langle \hat{N}_{\mathbf{r}} \rangle = \int_v d^3r n = nv. \quad (11.43)$$

Для среднего значения квадрата этого оператора мы получим

$$\langle \hat{N}^2(v) \rangle = \frac{1}{V^2} \int_v d^3r \int_v d^3r' \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} e^{i[(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}+(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{r}']} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_4} \rangle. \quad (11.44)$$

Здесь матричный элемент равен

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \Psi_0(N) | \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^\dagger | \hat{a}_{\mathbf{k}_4} \Psi_0(N) \rangle = \delta_{\mathbf{k}_1 0} \delta_{\mathbf{k}_4 0} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} [1 + (N-1) \delta_{\mathbf{k}_2 0}]. \quad (11.45)$$

Это сводит уравнение (11.44) к

$$\langle \hat{N}^2(v) \rangle = \frac{N}{V^2} \int_v d^3r \int_v d^3r' \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} [1 + (N-1) \delta_{\mathbf{k}0}]. \quad (11.46)$$

Поскольку

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \Rightarrow \int \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = V \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad (11.47)$$

мы находим среднеквадратичную флуктуацию

$$\left\langle \left( \Delta N(v) \right)^2 \right\rangle = \langle N^2(v) \rangle - \langle N(v) \rangle^2 = N \frac{v}{V} \left( 1 - \frac{v}{V} \right), \quad (11.48)$$

которая, естественно, исчезает для  $v = 0$  и  $v = V$ . Относительная флуктуация падает как  $1/\sqrt{N}$ , как всегда для экстенсивных статистических величин. Отметим, что такие же результаты для средних значений (11.43), (11.46) и (11.48) получаются из классического биномиального распределения

$$P(N_v) = \frac{N!}{N_v!(N - N_v)!} \left( \frac{v}{V} \right)^{N_v} \left( 1 - \frac{v}{V} \right)^{N - N_v}. \quad (11.49)$$

Корреляционная функция плотности может быть определена как

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{N}_{\mathbf{r}} \hat{N}_{\mathbf{r}'} \rangle - n^2. \quad (11.50)$$

По аналогии с (11.46) и (11.47)

$$\langle \hat{N}_{\mathbf{r}} \hat{N}_{\mathbf{r}'} \rangle = \frac{N}{V^2} [V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + (N - 1)], \quad (11.51)$$

поэтому

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n \left[ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{V} \right]; \quad (11.52)$$

последний член даёт только малую поправку  $\sim 1/V$ .

## 11.7. Двухчастичные операторы

Рассмотрим теперь оператор, зависящий от переменных *par* тождественных частиц. Наиболее важный пример — это гамильтониан взаимодействия двух тел.

Характерная структура *двухчастичного оператора* имеет вид

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a \neq b} \hat{f}_{ab}^{(2)}. \quad (11.53)$$

Во вторичном квантовании она принимает инвариантную форму

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{1234} (12| \hat{f}^{(2)} |34) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4 \quad (11.54)$$

с прозрачным физическим смыслом. Чтобы увидеть, как выражение (11.54) появляется, предположим, что  $f_{ab}^{(2)}$  зависит от переменных  $q_a$  и  $q_b$  взаимодействующих частиц. Тогда мы можем формально переписать (11.53), включая член самодействия  $a = b$ :

$$\begin{aligned}\hat{F}^{(2)} &= \sum_{ab} \hat{f}^{(2)}(q_a, q_b) - \sum_a \hat{f}^{(2)}(q_a, q_a) = \\ &= \int dqdq' f^{(2)}(q, q') \left\{ \sum_{ab} \delta(\hat{q}_a - q) \delta(\hat{q}_b - q') - \right. \\ &\quad \left. - \delta(q - q') \sum_a \delta(\hat{q}_a - q) \right\}.\end{aligned}\quad (11.55)$$

Вводя оператор плотности (11.38, 11.39) для переменной  $q$ , преобразуем это выражение к

$$\hat{F}^{(2)} = \int dqdq' f^{(2)}(q, q') \left\{ \hat{N}_q \hat{N}_{q'} - \delta(q - q') \hat{N}_q \right\}.\quad (11.56)$$

Оператор в фигурных скобках в уравнении (11.56) в силу коммутационных соотношений равен

$$\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_{q'}^\dagger \hat{a}_{q'} - \delta(q - q') \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q = \pm \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_{q'}^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_{q'}.\quad (11.57)$$

Перестановка двух последних операторов даёт общий знак плюс, поэтому оператор (11.56) принимает вид

$$F^{(2)} = \int dqdq' f^{(2)}(q, q') \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_{q'}^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_{q'}.\quad (11.58)$$

Преобразование к произвольному базису приводит к уравнению (11.54), где коэффициенты  $(12|f|34)$  являются матричными элементами двухчастичного оператора  $\hat{f}^{(2)}$  для перехода  $(3,4) \rightarrow (1,2)$ :

$$(12|\hat{f}^{(2)}|34) = \int dqdq' \psi_1^*(q) \psi_2^*(q') \hat{f}^{(2)}(q, q') \psi_3(q') \psi_4(q).\quad (11.59)$$

Здесь  $\psi_1(q) = (q|1)$  — функции преобразования базиса, т. е. волновые функции состояний  $|1\rangle$  в  $q$ -представлении. Отметим порядок аргументов этих функций в подинтегральном выражении (11.59).

### 11.8. Межчастичное взаимодействие в базисе плоских волн

Как было упомянуто, двухчастичный оператор появляется главным образом при рассмотрении взаимодействия между частицами. В системе не очень высокой плотности наиболее важные взаимодействия — парные, и мы ограничимся этим случаем. При необходимости учесть многотельные взаимодействия рассмотрение может быть расширено очевидным образом.

Если взаимодействие частиц  $a$  и  $b$  можно описать оператором  $U_{ab}$ , полный гамильтониан взаимодействия в системе многих частиц, в соответствии с уравнением (11.53), равен

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} U_{ab}. \tag{11.60}$$

Здесь множитель  $1/2$  необходим, поскольку каждая пара  $a, b$  ( $a \neq b$ ) должна учитываться только один раз. Для тождественных частиц это приводит к вторично-квантованной форме (11.54)

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234} (12|U|34) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4. \tag{11.61}$$

Структура взаимодействия (рис. 11.1,а) описывает двухчастичное столкновение с участием пары частиц, подвергающихся переходу  $(4, 3 \rightarrow 2, 1)$ , где, в соответствии со структурой матричного элемента (11.59), мы маркируем приходящие и уходящие линии диаграммы против часовой стрелки,  $4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ . Это представление процесса относится к *каналу частица-частица*.

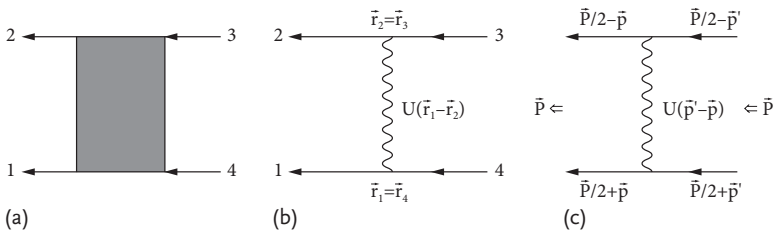


Рис. 11.1. Диаграммы взаимодействия двух тел

Для эрмитова гамильтониана  $H^\dagger = H'$ , двухчастичные матричные элементы удовлетворяют условию

$$(12|U|34) = (43|U|21)^*. \quad (11.62)$$

Другое свойство матричных элементов следует из коммутационных соотношений одночастичных операторов: для любой статистики частиц одновременная перестановка в парах начальных и конечных частиц не изменяет амплитуды процесса:

$$(12|U|34) = (21|U|43). \quad (11.63)$$

При перестановке только начальных (или только конечных) частиц матричные элементы не имеют никакой симметрии. Однако полная сумма (11.61) содержит только симметризованную (для бозонов) или антисимметризованную (для фермионов) часть. Поэтому иногда удобно ввести матричные элементы определенной симметрии

$$\frac{1}{2} (12|\tilde{U}|34) = \frac{1}{2} \left[ (12|U|34) \pm (21|U|34) \right] \quad (11.64)$$

и записать полный оператор взаимодействия как

$$H' = \frac{1}{4} \sum_{1234} (12|\tilde{U}|34) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4. \quad (11.65)$$

В качестве примера рассмотрим случай *потенциального* взаимодействия, которое зависит от относительного расстояния  $r$  между частицами и не несет какой-либо зависимости от дополнительных квантовых чисел частиц, таких как спин или изоспин. Набор подходящих одночастичных квантовых характеристик в этом случае содержит лишь  $|1\rangle = |\mathbf{r}_1, \sigma_1\rangle$ , и *вершина* потенциала (рис. 11.1, b) имеет структуру

$$(12|U|34) = \delta_{\sigma_1\sigma_4} \delta_{\sigma_2\sigma_3} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (11.66)$$

Полный (не симметризованный) гамильтониан взаимодействия описывается выражением

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \hat{a}_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{r}_1\sigma_1}. \quad (11.67)$$

Для спин-спинового взаимодействия  $U_{ab} = U(r_{ab})(\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b)$  мы имеем

$$(12|U|34) = (\mathbf{s}_{\sigma_1\sigma_4} \cdot \mathbf{s}_{\sigma_2\sigma_3}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (11.68)$$

и

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) (\mathbf{s}_{\sigma_1 \sigma_4} \cdot \mathbf{s}_{\sigma_2 \sigma_3}) \hat{a}_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2 \sigma_3} \hat{a}_{\mathbf{r}_1 \sigma_4}. \quad (11.69)$$

Импульсное представление естественно для пространственно-однородной системы, когда каждое столкновение сохраняет полный импульс пары. Используя снова нормировку в объеме  $V$  (11.40), преобразуем гамильтониан (11.67) следующим образом (все импульсы квантованы в том же объеме):

$$H' = \frac{1}{2V^2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2 \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'_2 \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{p}'_1 \sigma_1} \times \int d^3 r_1 d^3 r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{(i/\hbar)[\mathbf{r}_1 \cdot (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) + \mathbf{r}_2 \cdot (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2)]}. \quad (11.70)$$

Вместо четырех импульсов  $\mathbf{p}_a$  частиц в процессе мы вводим (рис. 11.1,с) полные импульсы  $\mathbf{P}'$  и  $\mathbf{P}$  в канале частица-частица и относительные импульсы  $\mathbf{p}'$  и  $\mathbf{p}$  соответственно до и после столкновения

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\mathbf{P}}{2} + \mathbf{p}, \quad \mathbf{p}_2 = \frac{\mathbf{P}}{2} - \mathbf{p}, \quad \mathbf{p}'_1 = \frac{\mathbf{P}'}{2} + \mathbf{p}', \quad \mathbf{p}'_2 = \frac{\mathbf{P}'}{2} - \mathbf{p}'. \quad (11.71)$$

Интеграл по координатам в уравнении (11.70) теперь разбит на произведение двух независимых интегралов, по координате  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  центра масс и по относительному расстоянию  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  пары

$$\int d^3 r_1 d^3 r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{(i/\hbar)[\mathbf{r}_1 \cdot (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) + \mathbf{r}_2 \cdot (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2)]} = \int d^3 R e^{(i/\hbar)\mathbf{R} \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{P}')} \int d^3 r U(r) e^{(i/\hbar)\mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}')}. \quad (11.72)$$

Интеграл по координате центра масс выражает сохранение импульса

$$\int d^3 R e^{(i/\hbar)\mathbf{R} \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{P}')} = V \delta_{\mathbf{P}\mathbf{P}'}, \quad (11.73)$$

в то время как результат рассеяния определяется фурье-компонентой потенциала, соответствующего передаче импульса  $\mathbf{p}' - \mathbf{p}$  (сравните с борновским приближением, разд. 1.5)

$$U_{\mathbf{p}' - \mathbf{p}} = \int d^3 r U(r) e^{(i/\hbar)\mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}')}. \quad (11.74)$$

Окончательно гамильтониан взаимодействия в импульсном представлении может быть записан как

$$H' = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\mathbf{P} \mathbf{P} \mathbf{P}'} U_{\mathbf{P}' - \mathbf{P}} \hat{a}_{\mathbf{P} + \mathbf{P}/2, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{P} + \mathbf{P}/2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{P}' + \mathbf{P}/2, \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{P}' + \mathbf{P}/2, \sigma_1}. \quad (11.75)$$

## 11.9. Межчастичное взаимодействие в конечной системе

Дадим здесь пример пространственно ограниченной системы, где лучшим одночастичным базисом является не плосковолновой, а базис, определенный симметрией задачи (атом, молекула, атомное ядро).

В таких приложениях естественное одночастичное представление дается средним полем, гл. 13. Модель ядерных оболочек обычно использует сферический базис  $|1m_1\rangle$  со *спин-орбитальной связью*, где обозначение  $1$  комбинирует все одночастичные квантовые числа связанной схемы ( $\mathbf{j}_1 = \vec{\ell}_1 + \mathbf{s}_1$ ) за исключением проекции полного углового момента  $j_z = m$ . Двухчастичный гамильтониан принимает вид

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234; \{m\}} (1m_1, 2m_2 | U | 3m_3, 4m_4) \hat{a}_{1m_1}^\dagger \hat{a}_{2m_2}^\dagger \hat{a}_{3m_3} \hat{a}_{4m_4}. \quad (11.76)$$

Если изоспиновая инвариантность учитывается явно, то можно также выделить проекцию изоспина  $t_3 = \tau$  каждой частицы.

*Сохранение полного углового момента* налагает ограничения на амплитуды. В самом деле, если взаимодействие  $U$  является инвариантным относительно поворотов, то полный угловой момент  $L$  исходной пары  $(3, 4)$  должен быть равен таковому для конечной пары  $(1, 2)$ . Начальное состояние  $|3m_3, 4m_4\rangle$ , не связанное в полный угловой момент, является суперпозицией состояний с определенным значением  $L$  полного момента и полной проекции  $L_z = \Lambda$ :

$$|3m_3, 4m_4\rangle = \sum_{L\Lambda} C_{j_3 m_3 j_4 m_4}^{L\Lambda} |34; L\Lambda\rangle. \quad (11.77)$$

Аналогичное представление справедливо для конечного состояния:

$$(1m_1, 2m_2 | = \sum_{L'\Lambda'} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L'\Lambda'} (12; L'\Lambda'). \quad (11.78)$$

В этих определениях мы упорядочиваем одночастичные состояния таким образом, что, как на рис. 11.1, квантовые числа 1 и 4 для различных частиц соответствовали бы первой частице, а 2 и 3 – второй.

Матричные элементы  $U$ , как любого скалярного оператора, не меняют вращательные квантовые числа,  $L' = L$ ,  $\Lambda' = \Lambda$ . Более того, матричные элементы скаляра не зависят от проекции  $\Lambda$ . Следовательно, амплитуда процесса может быть записана как

$$(1m_1, 2m_2|U|3m_3, 4m_4) = \sum_{L\Lambda} C_{j_1 m_1}^{L\Lambda} C_{j_2 m_2}^{L\Lambda} C_{j_4 m_4}^{L\Lambda} C_{j_3 m_3}^{L\Lambda} U_L(12; 34) \quad (11.79)$$

с эффективными матричными элементами  $U_L(12; 34)$ , где  $m$ -зависимость уже исключена. Теперь мы можем комбинировать коэффициенты Клебша–Гордана с операторами рождения и уничтожения и образовывать операторы *рождения пары*:

$$\hat{P}_{L\Lambda}^\dagger(12) = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1}^{L\Lambda} C_{j_2 m_2}^{L\Lambda} \hat{a}_{1m_1}^\dagger \hat{a}_{2m_2}^\dagger \quad (11.80)$$

и эрмитово-сопряжённые операторы *уничтожения пары*:

$$\hat{P}_{L\Lambda}(12) = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1}^{L\Lambda} C_{j_2 m_2}^{L\Lambda} \hat{a}_{2m_2} \hat{a}_{1m_1}. \quad (11.81)$$

Таким образом, вращательно-инвариантное взаимодействие в канале частица-частица может быть приведено к виду

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234; L\Lambda} U_L(12; 34) \hat{P}_{L\Lambda}^\dagger(12) \hat{P}_{L\Lambda}(43). \quad (11.82)$$

В качестве простого обобщения мы получим для изоспин-инвариантного взаимодействия

$$\hat{P}_{L\Lambda; tt_3}^\dagger(12) = \sum_{m_1 m_2, \tau_1 \tau_2} C_{j_1 m_1}^{L\Lambda} C_{j_2 m_2}^{L\Lambda} C_{1/2 \tau_1}^{tt_3} C_{1/2 \tau_2}^{tt_3} \hat{a}_{1m_1 \tau_1}^\dagger \hat{a}_{2m_2 \tau_2}^\dagger, \quad (11.83)$$

$$\hat{P}_{L\Lambda; tt_3}(12) = \sum_{m_1 m_2, \tau_1 \tau_2} C_{j_1 m_1}^{L\Lambda} C_{j_2 m_2}^{L\Lambda} C_{1/2 \tau_1}^{tt_3} C_{1/2 \tau_2}^{tt_3} \hat{a}_{2m_2 \tau_2} \hat{a}_{1m_1 \tau_1}, \quad (11.84)$$

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234; L\Lambda; tt_3} U_{Lt}(12; 34) \hat{P}_{L\Lambda; tt_3}^\dagger(12) \hat{P}_{L\Lambda; tt_3}(43), \quad (11.85)$$

где  $t$  — полный изоспин пары (0 или 1 для нуклонов), и

$$(1m_1\tau_1, 2m_2\tau_2|U|3m_3\tau_3, 4m_4\tau_4) \\ = \sum_{L\Lambda, tt_3} C_{j_1m_1 j_2m_2}^{L\Lambda} C_{1/2\tau_1 1/2\tau_2}^{tt_3} C_{1/2\tau_4 1/2\tau_3}^{tt_3} C_{j_4m_4 j_3m_3}^{L\Lambda} U_{Lt}(12; 34). \quad (11.86)$$

В приложениях к ядрам операторы нуклонной пары (11.83) и (11.84) имеют простые свойства симметрии, которые следуют из Ферми-статистики и дополненности между спин-пространственными и изобарическими переменными. Если мы переставим два оператора рождения в сумме, входящей в уравнение (11.83), то в результате появится знак минус. Теперь мы восстановим соответствие между коэффициентами Клебша—Гордана и порядком операторов, переставив нижние пары индексов в обоих коэффициентах Клебша—Гордана, что даёт фазы  $(-)^{j_1+j_2-L}$  и  $(-)^{1/2+1/2-t}$ . В результате мы получим тот же оператор  $\hat{P}^\dagger$ , но с противоположным порядком невращательных квантовых чисел  $1$  и  $2$ :

$$\hat{P}_{L\Lambda, tt_3}^\dagger(12) = (-)^{j_1+j_2+L+t} \hat{P}_{L\Lambda, tt_3}^\dagger(21). \quad (11.87)$$

В частности, для пары нуклонов на одной одночастичной орбите,  $1=2$ , сумма  $L+t$  должна быть *нечётным* целым. Это соответствует факту, обсуждающемуся в следующем разделе (вспомним также задачу 9.1), что пара *эквивалентных* фермионов ( $t=1$ ) может иметь только *чётный* полный угловой момент  $L$ . Квазидейтронная пара ( $t=0$ ) может иметь только *нечётные* значения  $L$ ; как мы уже обсуждали, реальный дейтрон имеет  $t=0$  и полный угловой момент  $L=1$  (ранее это обозначалось как  $J$ ). Этот результат также является аналогом обобщенного принципа Паули (10.18), выведенного в  $ls$ -схеме. Аналогичным образом мы можем получить только *чётные*  $L$  и для бозонной пары (без спина или изоспина).

**Дополнительная литература:** [4], [66], [68]



Неразличимость тождественных частиц имеет важные, экспериментально проверяемые следствия. Например, спектры многоэлектронных атомов были бы совершенно другими, если бы электроны атомов были различимы.

*Е. Мерцбахер. «Квантовая механика»*

## Глава 12

### Атомные и ядерные конфигурации

#### 12.1. Приближение независимых частиц

В хорошем приближении многоэлектронный атом — это система  $N$  тождественных фермионов со спином  $1/2$  (электроны), движущихся в *среднем поле*, создаваемом совместно центральным ядром и всеми электронами. Мы оставляем задачу вывода этого поля для следующего раздела и рассматриваем здесь поле как внешнее. Электроны в молекуле также движутся в среднем поле, создаваемом ионами, тяжёлая масса которых оправдывает адиабатическую картину (разд. II.4.5), и всеми прочими электронами. Атомные ядра также могут рассматриваться как система независимых нуклонов в общем среднем поле. В этом случае нет центрального тела и полное поле обусловлено взаимодействием протонов и нейтронов. Тем не менее, мы также можем начать с приближения независимых частиц. Относительно новый пример — это холодные атомы в атомных ловушках, где отдельные атомы в некотором приближении могут рассматриваться как независимые. В этом случае поле ловушки действительно является внешним.

Многочастичная волновая функция всей системы должна быть полностью симметричной или антисимметричной при перестановках всех пространственных и спиновых переменных произвольной пары частиц. Это справедливо безотносительно к присутствию межчастичных взаимодействий. В приближении независимых частиц существует особый одночастичный базис  $|\lambda\rangle$ , который состоит из правильных орбиталей, найденных для данного внешнего поля. Каждое распределение  $N$  частиц по доступным орбиталам, совместимое с типом статистики, образует *конфигурацию*.

Во вторичном квантовании *многочастичная* волновая функция конфигурации может строиться с помощью операторов рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , помещающих все частицы на требуемые орбитали. В волновой функции независимых *фермионов* каждое занятое состояние появляется только один раз. Если обозначение  $\lambda$  включает в себя все одночастичные квантовые числа, то результат в представлении чисел заполнения имеет вид:

$$|\Psi\rangle = \prod_{\lambda} (\hat{a}_\lambda^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle, \quad (12.1)$$

где числа заполнения  $n_\lambda$  равны 0 или 1. Это полностью эквивалентно волновой функции, записанной как детерминант Слэтера. Здесь принцип Паули содержится в правилах антикоммутиации для операторов рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ .

Аналогичным образом мы можем выписать волновую функцию независимых *бозонов*, но тогда числа заполнения  $n_\lambda$  могут принимать произвольные целые значения от 0 до  $N$ . Следовательно, нам нужно добавить нормировочные множители

$$|\Psi\rangle = \prod_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{n_\lambda!}} (\hat{a}_\lambda^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle, \quad (12.2)$$

которые возникают из-за неразличимости частиц (полагая  $0! = 1$ , мы можем использовать эту формулу также для фермионов). В обоих случаях для бозонов и для фермионов энергия конфигурации независимых частиц описывается выражением

$$E^\circ(\{n_\lambda\}) = \sum_{\lambda} \varepsilon_\lambda n_\lambda, \quad (12.3)$$

где  $\varepsilon_\lambda$  — энергии независимых орбиталей.

## 12.2. Добавляя вращательную инвариантность

Предположим, что среднее поле обладает *сферической симметрией*. Это является хорошим приближением во многих случаях для атомов и ядер. В таком поле одночастичное движение сохраняет квантовые числа углового момента частицы:  $\ell$ ,  $m_\ell$  и  $m_s$  в раздельной схеме, или  $j$ ,  $\ell$  (или четность), и  $m_j$  в связанной спин-орбитальной схеме.

Однако детерминант Слэтера, построенный заполнением  $N$  таких орбиталей, вообще говоря, не имеет определенного значения полного орбитального момента  $L$  и полного спина  $S$ , или полного углового момента  $J$ . Поскольку

стационарные невырожденные состояния сферически симметричной системы как целого должны иметь определенные значения полного углового момента, мы вынуждены отказаться от волновой функции в виде одного детерминанта Слэтера (12.1) и комбинировать несколько таких детерминантов способом, определяемым правилами сложения углового момента. То же самое справедливо для Бозе-систем, где нам нужно комбинировать состояния (12.2).

В некоторых случаях такая комбинация возникает почти автоматически, мы видели примеры для двух нуклонов в разд. 9.5. Для фермионных орбиталей без спин-орбитальной связи, когда каждая одночастичная волновая функция является произведением пространственной и спиновой частей, не более чем две частицы могут иметь одинаковые орбитальные квантовые числа  $(n, \ell, m_\ell)$ . В случае пространственного совпадения для двух частиц спиновая волновая функция пары  $\chi_{SM_S}$  с необходимостью антисимметрична (синглет  $\chi_{00}$ ). Это мы видели и в задаче рассеяния, когда орбитальная функция симметрична, разд. 9.6. Такая ситуация имеет место в атоме гелия. В основном состоянии два электрона занимают низшую  $1s$ -орбиту, поэтому они автоматически образуют спиновую синглетную пару. Квантовые числа пары определяются без всяких усилий:

$$\ell_1 = \ell_2 = L = 0, \quad s_1 = s_2 = 1/2, \quad S = 0, \quad J = 0, \quad (12.4)$$

что соответствует спектроскопическому символу  $^1S_0$ .

Запишем волновую функцию основного состояния гелия во вторичном квантовании (12.1) с операторами рождения  $\hat{a}_{n\ell m_\ell m_s}^\dagger$ :

$$|\Psi_0\rangle = \hat{a}_{000\ 1/2}^\dagger \hat{a}_{000\ -1/2}^\dagger |0\rangle. \quad (12.5)$$

Здесь мы выстраиваем орбитали в порядке убывания проекций. Волновая функция (12.5) может быть переписана с помощью правил антикоммутиации

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2} (\hat{a}_{000\ 1/2}^\dagger \hat{a}_{000\ -1/2}^\dagger - \hat{a}_{000\ -1/2}^\dagger \hat{a}_{000\ 1/2}^\dagger) |0\rangle. \quad (12.6)$$

С обозначением  $(\sigma = m_s)$  это то же самое, что

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (-)^{1/2-\sigma} \hat{a}_{000\ \sigma}^\dagger \hat{a}_{000\ -\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (12.7)$$

или, вспоминая значения коэффициентов Клебша—Гордана (II.7.36),

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} C_{1/2\sigma\ 1/2-\sigma}^{00} \hat{a}_{000\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{000-\sigma}^{\dagger} |0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{a}_{000,s=1/2}^{\dagger} \hat{a}_{000,s=1/2}^{\dagger}]_{S=0} |0\rangle, \quad (12.8)$$

где символ  $[A_j B_{j'}]_{JM}$  означает векторное сложение двух подсистем  $\mathbf{j} + \mathbf{j}' = \mathbf{J}$ . Таким образом, в этом случае исходный детерминант Слэтера действительно выдаёт определённые значения  $L = S = J = 0$ . Конечно, это происходит, потому что мы взяли конфигурацию заполненного  $s$ -уровня.

Перейдем к возбуждённым состояниям атома гелия. Если в оболочке  $1s$  остаётся один электрон, в то время как второй переходит на оболочку с  $\ell > 0$ , то они больше не эквивалентны в том смысле, что нет ограничений на величину спина волновой функции, поскольку пространственные функции уже разные. Оба, синглетное и триплетное, состояния разрешены, и правильно преобразующаяся при вращениях волновая функция с определёнными значениями  $L, M_L$  (автоматически равными  $\ell, m_{\ell}$  возбуждённого электрона) и  $S, M_S$  такова:

$$|\Psi_{n\ell m_{\ell} S M_S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma\sigma'} C_{1/2\sigma\ 1/2\sigma'}^{S M_S} \hat{a}_{000\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n\ell m_{\ell}\sigma'}^{\dagger} |0\rangle. \quad (12.9)$$

Если оба электрона находятся на разных орбитах с ненулевым  $\ell$ , нам нужно добавить векторное сложение орбитальных моментов  $[\ell\ell']_{LM_L}$ . Создание таких пар может быть описано вторично квантованным оператором рождения пары (11.80). Наконец,  $L$  и  $S$  должны быть сложены в полный угловой момент с квантовыми числами  $J, M$ . Таким образом, конфигурации всего двух электронов показывают многообразие возможных вращательных мультиплетов.

Здесь мы можем слегка изменить определение того, что мы назвали *конфигурацией*. При наличии вращательной симметрии одночастичные энергии не зависят от сохраняющихся магнитных квантовых чисел,  $m_{\ell}$  и  $m_s$  в несвязанной схеме, и от  $m_j$  в схеме со спин-орбитальной связью. Мы будем объединять в конфигурацию все распределения с одинаковым количеством частиц на вырожденных орбиталях. Например, в сложном атоме мы можем положить  $n_1$  частиц на орбите  $\ell_1$ ,  $n_2$  частиц на орбите  $\ell_2$ , и так далее, без точного указания занятых значений  $m_{\ell}$  и  $m_s$ . Все распределения с одинаковыми значениями  $n_{\ell}$  относятся к одной конфигурации в новом значении этого слова; в модели ядерных оболочек это иногда называется *partition* (*разделение*). Внутри конфигурации обычно возможны

многие значения полного углового момента, которые имеют, в отсутствие межчастичных взаимодействий, одну и ту же энергию.

### 12.3. Многочастичные конфигурации

Для двух частиц разрешенные состояния были найдены в задаче 9.1. В многочастичной конфигурации ограничения, наложенные требованиями квантовой статистики, определяют разрешённые значения вращательных квантовых чисел. Чтобы найти эти значения, можно начать, как мы делали в стандартных задачах сложения угловых моментов (разд. II.7.6), с состояния с максимально возможной проекцией полного углового момента. Это обычно легко, поскольку проекции складываются алгебраически. Это «*корневое*» состояние должно быть построено с учётом требований статистики. Затем мы можем действовать понижающим оператором и спускаться вниз, заполняя на каждом шаге уже имеющиеся мультиплеты состояниями с более низкими проекциями и приписывая оставшиеся, разрешённые статистикой, состояния новым мультиплетам. Этот процесс лучше понять на примерах.

#### Задача 12.1

Три нейтральных атома, имеющие внутреннее состояние с полным угловым моментом  $F = 0$ , находятся на орбите в орбитальном моментом  $\ell = 2$  в атомной ловушке. Определить возможные значения полного углового момента системы; сравнить полное число состояний с результатом (9.20).

#### Решение.

Атомы подчиняются статистике Бозе и полное число состояний, в соответствии с уравнением (9.20) для  $N = 3$  и  $\Omega = 5$  (число различных проекций орбитального момента), равно

$$\mathcal{N}(3, 5) = \frac{7!}{3!4!} = 35. \quad (12.10)$$

Чтобы найти возможные значения полного углового момента

$$\mathbf{L} = \vec{\ell}_1 + \vec{\ell}_2 + \vec{\ell}_3, \quad (12.11)$$

мы построим сначала в исходной  $m$ -схеме состояние  $(m_1, m_2, m_3) = (2, 2, 2)$  с наивысшей проекцией  $M = L_z = 6$ . Такое состояние единственно и это подтверждает существование  $L = 6$ . Проекция  $M = 5$  может быть создана тремя способами,  $(1, 2, 2)$ ,  $(2, 1, 2)$  и  $(2, 2, 1)$ . Но для тождественных бозонов

это представляет только одно состояние, поскольку мы должны образовать *симметричную* комбинацию из этих трех возможностей, например, действуя оператором  $L_- = \ell_{1-} + \ell_{2-} + \ell_{3-}$  на корневое состояние. Существует только одна симметричная комбинация, она относится к мультиплету с  $L = 6$ , следовательно, у нас нет других состояний с  $M = 5$ , и значение  $L = 5$  невозможно. На следующем шаге  $M = 4$  у нас две независимые возможности, симметричная комбинация трех состояний с одной проекцией, равной 0 и двумя другими проекциями, равными 2, и симметричная комбинация трех состояний типа (1,1,2). Наличие двух симметричных состояний с  $M = 4$  есть сигнал появления нового мультиплета  $L = 4$  наряду с продолжающимся заполнением высшего мультиплета  $L = 6$ . Следующий шаг вниз  $M = 3$  даёт три симметричных комбинации типов (-1,2,2), (0,1,2) и (1,1,1). Две комбинации соответствуют предыдущим мультиплетам с  $L = 6$  и  $L = 4$ , в то время как присутствие третьей означает, что мультиплет с  $L = 3$  также разрешён. Продолжая этот процесс, мы найдем также возможные значения  $L = 2$  и  $L = 0$ . Таким образом, наш обзор возможных состояний даёт следующие разрешенные значения  $L$  для трех тождественных бозонов с  $\ell = 2$  («квадрупольные бозоны»):

$$L = 6, 4, 3, 2, 0. \quad (12.12)$$

Полное число состояний равно

$$\mathcal{N} = \sum_L (2L + 1) = 13 + 9 + 7 + 5 + 1 = 35, \quad (12.13)$$

в согласии с уравнением (12.10). Этот результат также применим к вибрационным состояниям сферических ядер: квадрупольные колебания формы могут быть смоделированы квантованием возбуждений типа поверхностных волн, *фононов*, обладающих угловым моментом 2.

### Задача 12.2

В средних и тяжёлых ядрах спин-орбитальная связь обычно сильна, поэтому нуклоны заполняют одночастичные уровни с определёнными значениями  $j$ ,  $\mathbf{j} = \boldsymbol{\ell} + \mathbf{s}$ . Ядро  $^{43}\text{Ca}$  может рассматриваться как состоящее из инертного ядра  $^{40}\text{Ca}$  и трёх валентных нейтронов на орбитали  $(\ell)_j = f_{7/2}$ . Определить возможные значения полного углового момента  $I$  ядра; проверить полное число состояний.

### Решение.

Полный угловой момент равен

$$\mathbf{I} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3. \quad (12.14)$$

Число разрешенных состояний, в соответствии с уравнением (9.19) для  $N = 3$  и  $\Omega = 8$ , равно

$$\mathcal{N}(3, 8) = \frac{8!}{3!5!} = 56. \quad (12.15)$$

Мы можем действовать тем же способом, как в предыдущей задаче. Состояние с наивысшим моментом можно построить заполнением в соответствии с принципом исключения Паули  $(m_1, m_2, m_3) = (7/2, 5/2, 3/2)$ . Конечно, это означает, что нам нужно построить детерминант Слэтера с этими занятыми одночастичными орбиталями или использовать три соответствующих оператора рождения. Это даёт наивысшее значение проекции  $M = 15/2$  и поэтому наивысший полный момент  $I = 15/2$ . Это состояние строится единственным способом и, следовательно, нам не нужно комбинировать несколько детерминантов. Существует также только одно состояние (детерминант Слэтера) с  $M = 13/2$ , а именно  $(7/2, 5/2, 1/2)$ . Это состояние относится к предыдущему мультиплету  $I = 15/2$ . Отсюда следует, что значение полного углового момента  $I = 13/2$  не разрешено. На следующем шаге  $M = 11/2$  мы получаем два возможных распределения проекций:  $(7/2, 3/2, 1/2)$  и  $(7/2, 5/2, -1/2)$ . Одна комбинация этих состояний принадлежит к  $I = 15/2$ , другая открывает новый мультиплет с  $I = 11/2$ , который, в свою очередь, должен иметь члены со всеми возможными более низкими проекциями. Состояния с отрицательными значениями  $M$  не дают новой информации. Эта процедура перечисления собирает все возможные значения углового момента (последний столбец). Значения  $I = 13/2$  и  $1/2$  не разрешены. Соответствующее полное число состояний равно

$$\mathcal{N} = \sum_I (2I + 1) = 16 + 12 + 10 + 8 + 6 + 4 = 56, \quad (12.16)$$

в согласии с общим правилом (12.15). Покажем полную процедуру:

$M = 15/2$	7/2	5/2	3/2	$I = 15/2$
$M = 13/2$	7/2	5/2	1/2	—
$M = 11/2$	7/2	3/2	1/2	$I = 11/2$
	7/2	5/2	-1/2	
$M = 9/2$	5/2	3/2	1/2	$I = 9/2$
	7/2	3/2	-1/2	
	7/2	5/2	-3/2	

$M = 7/2$	$5/2$	$3/2$	$-1/2$	$I = 7/2$
	$7/2$	$1/2$	$-1/2$	
	$7/2$	$3/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$5/2$	$-5/2$	
$M = 5/2$	$5/2$	$1/2$	$-1/2$	$I = 5/2$
	$5/2$	$3/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$1/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$3/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$5/2$	$-7/2$	
$M = 3/2$	$3/2$	$1/2$	$-1/2$	$I = 3/2$
	$5/2$	$1/2$	$-3/2$	
	$5/2$	$3/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$-1/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$1/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$3/2$	$-7/2$	
$M = 1/2$	$3/2$	$1/2$	$-3/2$	—
	$5/2$	$-1/2$	$-3/2$	
	$5/2$	$1/2$	$-5/2$	
	$5/2$	$3/2$	$-7/2$	
	$7/2$	$-1/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$1/2$	$-7/2$	

(12.17)

**Задача 12.3**

В атомах ближе к реальности  $LS$ -схема из-за слабого спин-орбитального взаимодействия. Атом азота имеет низшую электронную конфигурацию  $1s^2 2s^2 2p^3$ . Определить возможные квантовые числа  $L, S, J$  для этой конфигурации.

**Решение.**

Здесь перебор чуть более сложен потому, что нам нужно сначала перечислить проекции орбитального момента и спина по отдельности, а затем комбинировать их в согласии со статистикой Ферми. Только  $p$ -уровень доступен для размещения частиц и разрешены  $\Omega = 3 \times 2 = 6$  *одночастичных* состояний  $(m_\ell, m_s)$ :

$$(a) (1, 1/2); \quad (a') (1, -1/2);$$

$$(b) (0, 1/2); \quad (b') (0, -1/2);$$

$$(c) (-1, 1/2); \quad (c') (-1, -1/2).$$

Теперь мы заполняем эти состояния тремя частицами, образуя многочастичные состояния. Начнем с максимально возможной проекции полного орбитального момента  $M_L = 2$ . Это можно делать двумя путями, оба включают  $(a)$  и  $(a')$ :  $(aa'b)$ ,  $M_S = 1/2$ , и  $(aa'b')$ ,  $M_S = -1/2$ . Поскольку все ситуации будут симметричны для положительных и отрицательных  $M_L$  и  $M_S$ , мы можем снова ограничиться состояниями с положительными значениями обеих проекций:

$$\underline{M_L = 2} : \quad (aa'b), M_S = 1/2. \quad (12.18)$$

Следовательно, состояние с  $L = 2$  и  $S = 1/2$  разрешено, его спектроскопический символ есть  ${}^2D$ ; соответствующий полный угловой момент может быть  $J = 3/2$  или  $5/2$ . Для  $M_L = 1$  мы имеем

$$\underline{M_L = 1} : \quad (aa'c), M_S = 1/2; \quad (abb'), M_S = 1/2. \quad (12.19)$$

Одна комбинация этих состояний относится к предыдущему мультиплету, другая открывает новый с  $L = 1$  и  $S = 1/2$ , т. е.  ${}^2P$  с  $J = 1/2$  или  $3/2$ . Наконец комбинации, разрешённые для  $M_L = 0$ , включают

$$\underline{M_L = 0} : \quad (abc); \quad (abc'); \quad (ab'c); \quad (a'bc) \quad (12.20)$$

с проекцией спина  $M_S = 3/2$  для первого и  $M_S = 1/2$  для трех остальных случаев. Это указывает на новый (третий) мультиплет с  $L = 0$  и  $S = 3/2$ , который должен быть помечен как  ${}^4S$ , и здесь  $J = S$ . Три оставшиеся состояния с  $M_L = 0$  пополняют эти три мультиплета. Теперь мы можем перечислить все возможные термы конфигурации  $p^3$ . В стандартных обозначениях  ${}^{2S+1}(L)_J$ , где  $(L)$  — символ орбитального момента, имеем:

$${}^2D_{3/2,5/2}; \quad {}^2P_{1/2,3/2}; \quad {}^4S_{3/2}. \quad (12.21)$$

Полное число состояний должно быть

$$\mathcal{N}(3, 6) = \frac{6!}{3!3!} = 20. \quad (12.22)$$

Действительно, подсчитывая все состояния (12.21) с различными  $J$  и  $M_J$ , мы получим

$$\mathcal{N} = \sum_J (2J + 1) = 4 + 6 + 2 + 4 + 4 = 20. \quad (12.23)$$

## 12.4. Обменное взаимодействие

Когда частицы взаимодействуют, многочастичная волновая функция, взятая как детерминант Слэтера или как произведение независимых одночастичных функций, перестает быть стационарной. Мы уже упоминали, что базис совместимых с типом статистики конфигураций независимых частиц полон и часто удобен для учёта эффектов взаимодействия.

Рассмотрим в качестве примера двухчастичную систему (в действительности это может быть система валентных электронов или нуклоны поверх кора, который может приближённо считаться инертным). Пусть тождественные частицы занимают одночастичные состояния  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$  и при пренебрежении их взаимодействием мы имели бы энергию пары

$$E^0 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2. \quad (12.24)$$

Предположим, что взаимодействие  $U$  между частицами может рассматриваться как возмущение. Для различных одночастичных состояний (только этот случай разрешён для фермионов) невозмущенная волновая функция может быть записана как

$$|\psi_{12}\rangle = \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger |0\rangle, \quad (12.25)$$

где мы используем операторы рождения частиц;  $|0\rangle$  означает вакуум или состояние инертного кора, который не содержит орбиталей  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$ .

Общий вид взаимодействия во вторичном квантовании описывается уравнением (11.61)

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{3456} (34|U|56) \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_5 \hat{a}_6. \quad (12.26)$$

Мы обкладываем этот оператор бра- и кет-векторами (12.25) и вычисляем среднее значение без учёта возможного возмущения кора:

$$\langle \psi_{12} | U | \psi_{12} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{3456} (34|U|56) \langle 0 | \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_5 \hat{a}_6 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger | 0 \rangle. \quad (12.27)$$

Очевидные правила отбора определяют ненулевые вклады в бесконечную сумму в (12.27): операторы уничтожения  $5,6$  должны избавить нас от исходных операторов рождения  $2,1$  (мы не рассматриваем разрушение кора), и аналогично, операторы  $3,4$  занимают позиции  $1,2$ . Это, конечно, тривиально, поскольку мы рассматриваем здесь только двухчастичное

взаимодействие с фиксированными начальным и конечным состояниями. В этом месте в игру входит существование интерферирующих путей взаимодействия подобно тому, что было на рис. 9.2. Таким образом,

$$\hat{a}_5 \hat{a}_6 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger |0\rangle = (\delta_{62} \delta_{51} \mp \delta_{61} \delta_{52}) |0\rangle. \quad (12.28)$$

То же справедливо для конечной пары частиц. В результате

$$\langle \psi_{12} | U | \psi_{12} \rangle = \frac{1}{2} \{ (21|U|12) \mp (21|U|21) \mp (12|U|12) + (12|U|21) \} \quad (12.29)$$

или, на основании очевидной симметрии (11.63),

$$\langle \psi_{12} | U | \psi_{12} \rangle = (21|U|12) \mp (12|U|12). \quad (12.30)$$

Эта автоматическая (анти)симметризация, см. (11.64), соответствует диаграмме на рис. 9.1; знаки  $-$  и  $+$  берутся для фермионов и бозонов соответственно.

В случае *различимых* частиц, описываемых операторами  $\hat{a}$  и  $\hat{b}$ , вместо (12.30) гамильтониан взаимодействия имел бы вид

$$\hat{U}^{\text{dist}} = \sum_{3456} (34|U|56) \hat{a}_3^\dagger \hat{b}_4^\dagger \hat{b}_5 \hat{a}_6, \quad (12.31)$$

и мы получили бы энергию взаимодействия

$$\langle \psi_{12} | U^{\text{dist}} | \psi_{12} \rangle = (21|U|12), \quad (12.32)$$

независимо от предположения, что операторы  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  коммутируют или антикоммутируют с  $\hat{b}$ ,  $\hat{b}^\dagger$ . Только *прямой* член  $(21|U|12)$  в этом случае описывает взаимодействие между частицами, тогда как тождественность частиц приводит к дополнительному *обменному* вкладу  $(12|U|12)$ .

#### Задача 12.4

Вычислить прямые и обменные матричные элементы для взаимодействия двух тождественных частиц в однородной среде (уравнение (11.75)), предполагая, что взаимодействие не зависит от спинов частиц.

#### Решение.

Состояние  $|\psi_{12}\rangle$  есть

$$|\psi_{12}\rangle = \hat{a}_{\mathbf{p}_2 \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}^\dagger |0\rangle. \quad (12.33)$$

Полный импульс пары  $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$  не изменяется при перестановке частиц, в то время как относительный импульс  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2$  меняет знак (ср. разд. 9.6 и рис. 9.1). Это даёт

$$\langle \psi_{12} | U | \psi_{12} \rangle = \frac{1}{V} (U_0 \mp U_{2\mathbf{p}} \delta_{\sigma_1 \sigma_2}). \quad (12.34)$$

Обменный процесс со спин-независимым взаимодействием эффективен только для частиц с одинаковым состоянием спина («параллельные» спины).

## 12.5. Двухэлектронная система

Обменное взаимодействие играет важную роль в определении наиболее энергетически выгодных состояний систем с тождественными частицами. Идея того, как это получается, может быть понята из простого примера двухэлектронного атома (гелий или атом с двумя валентными электронами на верхних заполненных оболочках).

Нерелятивистский гамильтониан двухэлектронной системы во внешнем (ядерном) поле описывается выражением

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - Ze^2 \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (12.35)$$

Для простоты будем рассматривать последний член (12.35), электрон-электронное электростатическое взаимодействие, как возмущение. В нулевом приближении мы берём обычную водородоподобную волновую функцию независимых электронов. Полная волновая функция должна быть построена как правильная антисимметричная комбинация, учитывающая также спиновые переменные. Пусть электроны будут в пространственных состояниях  $|\nu\rangle$  с квантовыми числами  $n, \ell, m$  и  $|\nu'\rangle$  с квантовыми числами  $n', \ell', m'$ . Запишем их полные *пространственные* волновые функции с определённой симметрией:

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_\nu(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_2) + \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_1) \psi_\nu(\mathbf{r}_2) \right) \quad (12.36)$$

и

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_\nu(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_2) - \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_1) \psi_\nu(\mathbf{r}_2) \right) \quad (12.37)$$

для  $\nu \neq \nu'$ , и

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\nu(\mathbf{r}_1)\psi_{\nu'}(\mathbf{r}_2) \quad (12.38)$$

для  $\nu = \nu'$ . Полная спиновая функция  $\chi_{SM_S}$  может быть синглетом  $\chi_{00}$  и триплетом  $\chi_{1M_S}$ . По аналогии с разд. 9.6 разрешённые атомные волновые функции есть

$$\Psi_S \cdot \chi_{00} \quad \text{и} \quad \Psi_A \cdot \chi_{1M_S}, \quad M_S = 1, 0, -1. \quad (12.39)$$

В нулевом приближении *все четыре функции (12.39) вырождены*, и их энергия является суммой атомных энергий занятых орбит  $\nu$  и  $\nu'$ :

$$E_{\nu\nu'}^0 = \varepsilon_\nu + \varepsilon_{\nu'}. \quad (12.40)$$

Уже в первом приближении теории возмущений кулоновское отталкивание расщепляет вырожденные состояния (12.39). Для  $\nu = \nu'$  антисимметричная пространственная функция (12.37) зануляется, и единственное возможное состояние — это спиновый синглет  $\Psi_S\chi_{00}$ , который будет сдвинут вверх кулоновским отталкиванием.

### Задача 12.5

Вычислить по теории возмущений энергию основного состояния гелиеподобного атома и энергию ионизации.

#### Решение.

Здесь нам понадобится только прямой интеграл, включающий две водородоподобные волновые функции  $\psi_0(r)$  для заряда  $Z = 2$ :

$$J = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^2(r_1)\psi_0^2(r_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (12.41)$$

Используем мультипольное разложение (II.6.58) кулоновского потенциала

$$\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell m} \frac{4\pi}{2\ell + 1} \frac{r_{<}^\ell}{r_{>^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}_1) Y_{\ell m}(\mathbf{n}_2) \quad (12.42)$$

и сохраним только монопольный член  $\ell = m = 0$ , оставшийся после интегрирования изотропных функций. С явным выражением водородных функций уравнение (12.41) сводится к двум радиальным интегралам ( $a$  — борковский радиус)

$$J = \frac{4Z^6 e^2}{\pi a^6} \int_0^\infty dr_1 \left\{ \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 r_1 + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_1^2 r_2 \right\} e^{(-2Z/a)(r_1+r_2)}. \quad (12.43)$$

Элементарное интегрирование даёт

$$J = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a}. \quad (12.44)$$

Энергия основного состояния в этом приближении равна

$$E_0 = 2\varepsilon_0 + J = -2 \frac{(Ze)^2}{2a} + \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a} = -\frac{Z^2 e^2}{a} \left(1 - \frac{5}{8Z}\right). \quad (12.45)$$

После ионизации атома мы остаемся с положительным ионом в основном состоянии с энергией  $-(Ze)^2/2a$ ; следовательно, энергия ионизации равна

$$E_{\text{ion}} = -\frac{(Ze)^2}{2a} - E_0 = \frac{Z^2 e^2}{2a} \left(1 - \frac{5}{4Z}\right). \quad (12.46)$$

### Задача 12.6

Улучшить результат теории возмущений предыдущей задачи, рассматривая заряд ядра как варьируемый параметр.

#### Решение.

Экранировка заряда ядра другим электроном может быть аппроксимирована эффективным зарядом ядра. Следовательно, мы используем пробные водородоподобные волновые функции электронов, заменяя в  $\psi_0$  реальный заряд  $Z$  варьируемым параметром  $\zeta$ . С этой функцией кинетическая энергия электронов равна

$$K_0 = 2 \frac{(\zeta e)^2}{2a} = \frac{(\zeta e)^2}{a}; \quad (12.47)$$

потенциальная энергия притяжения к заряду ядра  $Z$  равна

$$U_0 = -2 \frac{Z\zeta e^2}{a}; \quad (12.48)$$

электростатическая энергия электрон-электронного взаимодействия становится вместо (12.44)

$$J = \frac{5}{8} \frac{\zeta e^2}{a}. \quad (12.49)$$

Полная энергия  $E_0(\zeta) = K_0 + U_0 + J$  достигает минимума при

$$\zeta = Z - \frac{5}{16}, \quad E_0 = -\frac{e^2}{a} \left( Z^2 - \frac{5}{8}Z + \frac{25}{256} \right). \quad (12.50)$$

Энергия ионизации становится (ср. с (12.46))

$$E_{\text{ion}} = \frac{Z^2 e^2}{2a} \left( 1 - \frac{5}{4Z} + \frac{25}{128Z^2} \right). \quad (12.51)$$

Энергия (12.51) отличается от действительного значения для гелия на 5,5% (как и должно быть, точное основное состояние имеет меньшую энергию, чем его вариационное приближение). Для более тяжелых гелиеподобных атомов варьируемый результат быстро достигает экспериментального значения, демонстрируя увеличение достоверности приближения *среднего поля*.

При  $\nu \neq \nu'$  все четыре состояния (12.39) разрешены; поскольку взаимодействие не зависит от спина, три триплетных состояния остаются вырожденными. Но синглетное и триплетное состояния будут расщеплены. Это чисто квантовый эффект тождественных частиц: даже когда силы не зависят от спинов, полный спин  $S$  определяет *соответствующую симметрию* пространственной части волновых функций и по этой причине влияет на энергию.

Вычисляя подобно (12.30) сдвиг энергии состояний (12.36) и (12.37), мы придем к аналогичному результату: в первом приближении сдвиг даётся суммой прямого и обменного вкладов кулоновского взаимодействия  $U$  между электронами,

$$\langle \Psi_S | U | \Psi_S \rangle = (\nu\nu' | U | \nu'\nu) + (\nu\nu' | U | \nu\nu'), \quad (12.52)$$

$$\langle \Psi_A | U | \Psi_A \rangle = (\nu\nu' | U | \nu'\nu) - (\nu\nu' | U | \nu\nu'). \quad (12.53)$$

Обычно вводятся определения *прямого*  $J_{\nu\nu'}$  и *обменного*  $K_{\nu\nu'}$  интегралов:

$$J_{\nu\nu'} = (\nu\nu' | U | \nu'\nu) = \int d^3r_1 d^3r_2 |\psi_\nu(\mathbf{r}_1)|^2 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\psi_{\nu'}(\mathbf{r}_2)|^2, \quad (12.54)$$

$$K_{\nu\nu'} = (\nu\nu' | U | \nu\nu') = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_\nu^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu'}^*(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_1) \psi_\nu(\mathbf{r}_2). \quad (12.55)$$

Только прямой интеграл  $J_{\nu\nu'}$  имеет простой классический аналог — обычное электростатическое взаимодействие пространственно распределённых

заряженных облаков  $|\psi_\nu|^2$  и  $|\psi_{\nu'}|^2$ . Обменный интеграл  $K_{\nu\nu'}$  возникает полностью из-за квантовой интерференции.

Прямой интеграл дает равный (положительный) сдвиг энергии для обоих значений спина,  $S = 0$  и  $1$ ; такой же сдвиг имеет место для различных частиц. Обменный интеграл также положителен для кулоновского взаимодействия, но для той же пары  $(\nu\nu')$  этот член сдвигает пространственно-симметричную функцию  $\Psi_S$  выше по энергии, чем антисимметричную функцию  $\Psi_A$ . Поэтому при отсутствии зависящего от спина взаимодействия спиновые синглетные состояния оказываются выше, чем триплетные состояния для той же двухэлектронной конфигурации. Это качественно понятно: триплет связан с антисимметричной функцией  $\Psi_A$ , которая имеет *узел* при  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ , поэтому электроны приближаются друг к другу с меньшей вероятностью, что уменьшает положительный эффект кулоновского отталкивания. Окончательно для  $\nu \neq \nu'$  имеем

$$\delta E_{\nu\nu'}(S = 0) = J_{\nu\nu'} + K_{\nu\nu'}, \quad \delta E_{\nu\nu'}(S = 1) = J_{\nu\nu'} - K_{\nu\nu'}. \quad (12.56)$$

Для двух электронов в том же пространственном состоянии,  $\nu = \nu'$ , из (12.38) мы находим

$$\delta E_{\nu\nu} = J_{\nu\nu}. \quad (12.57)$$

Здесь обменный вклад отсутствует, как это было в (12.34) для антипараллельных спинов.

Дополнительный важный урок этого рассмотрения состоит в том, что, как отмечалось ранее, правильная (анти)симметризация волновой функции необходима, только если волновые функции тождественных частиц перекрываются. Если состояния  $|\nu\rangle$  и  $|\nu'\rangle$  локализованы в разных пространственных областях, то обменный интеграл  $K_{\nu\nu'}$  исчезает, и физические результаты совпадают с теми, что получены с использованием несимметризованной волновой функции (прямой интеграл остается в силу дальнегодействующего характера кулоновского взаимодействия).

## 12.6. Атом гелия: оптический спектр

Наши результаты объясняют главные свойства оптического спектра атома гелия, хотя теория возмущений недостаточна для количественных предсказаний.

*Основное состояние* соответствует конфигурации  $1s^2$ , где степень 2 говорит, что мы имеем два эквивалентных *спаренных* электрона на низшей оболочке  $1s$  ( $n = 1, \ell = m = 0$ ). В соответствии с принципом Паули спиновая волновая функция является синглетом  $\chi_{00}$ , атомные квантовые

числа  $L = S = J = 0$ ; с помощью спектроскопических обозначений мы пометим основное состояние атома как

$${}^{2S+1}(L)_J \Rightarrow {}^1S_0. \tag{12.58}$$

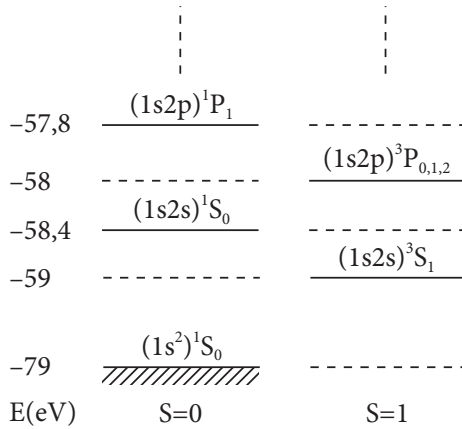


Рис. 12.1. Энергетический спектр низколежащих состояний атома гелия

Первые *возбуждённые* состояния соответствуют переходу электрона на орбиту  $n = 2$ . При этом электроны становятся неэквивалентными, и мы получаем возможные термы

конфигурация	$L$	синглеты	триплеты
$1s2s$	0	${}^1S_0$	${}^3S_1$
$1s2p$	1	${}^1P_1$	${}^3P_{0,1,2}$

(12.59)

Имеются две серии уровней (рис. 12.1): синглеты и триплеты. Синглетное основное состояние может быть названо *парагелий* по аналогии с пара- и ортопозитронием. Для всех синглетов  $J = L$  и отсутствует тонкая структура. Триpletные состояния начинаются с конфигурации *ортогелия*  $1s2s$  и  $L = 0$ . Для заданной конфигурации состояния с большим  $L$  обладают более высокими энергиями. Так проявляется эффект экранировки из-за электрон-электронного отталкивания. Более высокие триплеты с  $L > 0$  для заданного  $L$  могут иметь три значения  $J = L, L \pm 1$ , которые расщеплены релятивистскими эффектами тонкой структуры.

В оптическом диапазоне излучения имеются *электрические дипольные* переходы. Такие переходы между триплетами и синглетами запрещены вследствие ортогональности спиновых состояний. Поэтому состояние ортогелия оказывается долгоживущим (метастабильным). Становясь возбужденными в атомных столкновениях, атомы в триплетном  $S$ -состоянии образуют иной газ, отличный от парагелия. Последний является диамагнетиком, раздел П.9.11, в то время как ортогелий — парамагнетик.

На этом примере можно снова увидеть, что требования определённой перестановочной симметрии совместимы с классификацией стационарных состояний по собственным значениям глобальных операторов  $(\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{J}})$ . Все эти операторы *аддитивны*, т. е. выражаются как суммы тождественных одночастичных операторов (разд. 11.6) и коммутируют со всеми операторами перестановок  $\hat{P}_{ab}$ .

## 12.7. Правила Хунда

Обменная энергия взаимодействия (12.56) между двумя тождественными частицами, определяемая пространственной и дополнительной спиновой симметриями, может быть выражена через искусственное *спин-спиновое* взаимодействие. Формально это связано с оператором обмена спинами (П.7.27), который выглядит аналогично взаимодействию, зависящему от взаимной ориентации спинов.

Как мы видели при решении задачи 9.7, комбинации  $(1 \mp \hat{P}^\sigma)/2$  выделяют синглетную или триплетную часть любой величины, зависящей от спиновых переменных двух частиц. Поэтому среднее значение  $\delta E_{\nu\nu'}$  электростатической энергии для электронов, занимающих разные орбитали  $\nu$  и  $\nu'$ , может быть записано как

$$\begin{aligned} \delta E_{\nu\nu'} &= \frac{1}{4} [3\delta E_{\nu\nu'}(S=1) + \delta E_{\nu\nu'}(S=0)] \\ &+ \frac{1}{4} [\delta E_{\nu\nu'}(S=1) - \delta E_{\nu\nu'}(S=0)] (\sigma_1 \cdot \sigma_2). \end{aligned} \quad (12.60)$$

Здесь зависящий от спинов член равен

$$\delta E_{\nu\nu'}^{\text{spin}} = -\frac{K_{\nu\nu'}}{2} (\sigma_1 \cdot \sigma_2), \quad (12.61)$$

что в случае атома эквивалентно эффективному выстраиванию спинов ( $K > 0$ ).

В сложных атомах с многими валентными электронами это эффективное электростатическое взаимодействие расщепляет состояния одной конфигурации, которые были вырождены в приближении независимых частиц, в соответствии с разными схемами связи углового момента. Как мы видели на простом примере атома азота (задача 12.3), в результате электростатического расщепления возникает несколько возможных *электронных термов* с комбинациями  $(L, S)$ , совместимыми с принципом Паули. Эти термы имеют разные энергии; меньшие релятивистские эффекты расщепляют далее каждый  $LS$ -терм на уровне тонкой структуры  $LSJ$ . Наконец, на ещё меньших масштабах расщепления мы приходим к сверхтонкой структуре, характеризуемой квантовыми числами  $LSJF$ .

Эмпирические данные и более точные расчёты для сложных атомов устанавливают *правила Хунда* для определения *низшего* по энергии  $LS$ -терма. Согласно *первому* правилу, низший терм соответствует *максимально* возможному значению полного спина  $S$ . С идеей эффективного спин-спинового взаимодействия (12.61) мы понимаем этот результат как предпочтение наиболее симметричной полной спиновой волновой функции, которая соответствует для Ферми-статистики минимуму пространственной симметрии и, следовательно, минимальному кулоновскому отталкиванию. *Второе правило* выбирает низший терм среди состояний с максимальным  $S$  и различными значениями  $L$ , если имеются несколько возможных. Минимальная энергия соответствует *максимальному* разрешённому значению  $L$ . Это снова соответствует минимальному перекрытию пространственных орбит электростатически отталкивающихся электронов; максимальное перекрытие имеет место для спаренных электронов на *сопряженных по времени* орбитах  $|\ell, m_\ell\rangle$  и  $|\ell, -m_\ell\rangle$  (разд. II.5.6), угловые моменты которых сложены в минимальное значение  $L = 0$ .

### Задача 12.7

Определить низший терм для атома азота, где допустимые наборы квантовых чисел были найдены в задаче 12.3.

### Решение.

В соответствии с *правилом Хунда*, терм основного состояния должен быть  ${}^4S_{3/2}$  с максимальным спином  $S = 3/2$  и  $L = 0$ . Это можно определить без полного перечисления всех возможных состояний. Достаточно установить, что максимальный спин равен  $3/2$ , и он соответствует выстраиванию всех трех электронных спинов. Тогда все орбитальные проекции  $m_\ell$  электронов должны быть различными, складываясь в  $M_L = 1 + 0 + (-1) = 0$ . Поэтому

$L = 0$ , что всегда имеет место в случае состояния с максимальным спином для орбитали, заполненной наполовину.

## 12.8. Симметрия частица—дырка

В атомах *заполненные оболочки* являются конфигурациями, где все одночастичные состояния с разными проекциями спина  $m_s$  и орбитального момента  $m_\ell$ , возможные для заданных квантовых чисел  $n$  и  $\ell$ , заполнены. Тогда проекции  $M_S, M_L, M_J$  суммарного спина  $S$ , суммарного орбитального  $L$  и полного углового момента  $J$  равны нулю. Состояние заполненных оболочек единственно и, очевидно, вращательно инвариантно (скаляр). Соответствующий терм — это  $^1S_0$  и  $S = L = J = 0$ .

В ядрах (или тяжелых атомах) спин-орбитальная связь является сильной и вместо  $LS$ -связи следует использовать  $jj$ -схему связи, когда мы сначала находим  $\mathbf{j} = \boldsymbol{\ell} + \mathbf{s}$  для каждой частицы, а затем складываем их в полный угловой момент  $\mathbf{J} = \sum_a \mathbf{j}_a$ . В этой схеме индивидуальное значение орбитального момента  $\ell_a$  всё ещё значимо; оно определяет чётность одночастичной орбитали. Ядерная  $\ell s$ -связь генерирует спин-орбитальный дублет  $j = \ell \pm 1/2$  со знаком расщепления, противоположным атомному случаю, — уровень с большим  $j$  имеет меньшую энергию. Тогда мы можем заполнять  $j$ -уровни один за другим, и заполненный  $j$ -уровень снова имеет свойства замкнутой оболочки  $J = 0$ ; поскольку только  $J$  и чётность  $\Pi$  имеют определённые значения, обычно в спектроскопии используется обозначение  $J^\Pi$ , поэтому заполненный уровень соответствует состоянию  $0^+$ .

### Задача 12.8

$N$  протонов в ядре занимают оболочку с угловым моментом  $j$ . Каков наибольший возможный угловой момент  $J_{\max}(N)$  системы? При каком числе частиц это наибольшее значение достигает максимума?

#### Решение.

При заданном  $N$

$$J_{\max}(N) = \frac{1}{2} N(2j + 1 - N). \quad (12.62)$$

Наибольшее возможное значение этой величины достигается при оболочке, заполненной наполовину:

$$N = \frac{2j + 1}{2} \rightsquigarrow J_{\max} = \frac{(2j + 1)^2}{8}. \quad (12.63)$$

Если заполненная оболочка может принять  $\Omega$  фермионов, но в действительности имеет только  $N \leq \Omega$  частиц на этой оболочке, то можно сказать, что многочастичное состояние имеет  $\Omega - N$  дырок. Это особенно удобно для оболочки, занятой  $N > \Omega/2$  частицами ( $\Omega$  всегда чётное число). Дырки как отдельные объекты подчиняются статистике Ферми, поскольку одночастичное состояние либо занято, либо пусто. Формально мы можем сделать каноническое преобразование частица-дырка простым обменом между операторами рождения и уничтожения. Вакуум в картине дырок является полностью заполненной оболочкой, оператор  $\hat{h}_{jm}^\dagger = \hat{a}_{jm}$  создает дырку с квантовыми числами  $j, m$  (для определенности мы используем здесь  $jj$ -схему; но всё так же справедливо и в  $ls$ -схеме для операторов  $\hat{a}_{\ell m \ell m_s}$ ), в то время как оператор  $\hat{h}_{jm} = \hat{a}_{jm}^\dagger$  заполняет пустое место, уничтожая дырку. Антиккоммутационные свойства (11.14) инвариантны при преобразовании частица-дырка.

Рассмотрим состояние  $N$  частиц в оболочке емкостью  $\Omega$ . Пусть это состояние имеет вращательные квантовые числа  $JM$ . Мы знаем, что в этом случае нам нужно образовать специальную комбинацию детерминантов Слэтера, или  $N$  операторов рождения  $\hat{a}^\dagger$ , с правильной вращательной симметрией. Если мы внесём недостающие  $(\Omega - N)$  частиц в эту комбинацию, мы получим заполненную оболочку с квантовыми числами  $|JM = 00\rangle$ . Это означает, что дополняющая комбинация имеет квантовые числа  $J, -M$  и существует взаимно однозначное соответствие между состояниями из  $N$  и  $\Omega - N$  частиц, или между состояниями из  $N$  частиц и  $N$  дырок, поэтому

$$\begin{aligned} & |00; \text{заполненная оболочка}\rangle = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \sum_M (-)^{J-M} |JM; N \text{ частицы}\rangle |J-M; N \text{ дырки}\rangle, \end{aligned} \quad (12.64)$$

где мы использовали правило (II.7.34) для образования вращательного инварианта (скаляра). Заметим, что дырочная компонента совпадает в уравнении (12.64) с сопряженной по времени в соответствии с (II.5.68). Результат (12.62) обладает явной симметрией частица-дырка. В схеме  $LS$ -связи состояния дырок имеют те же значения всех угловых моментов  $S, L$ , и  $J$ , как и состояния частиц.

### Задача 12.9

Используя правила Хунда, найти низший терм для атомных конфигураций  $p^N$  с  $N$  электронами на  $p$ -орбите.

**Решение.**

$N$  может принимать значения от нуля до шести, и симметрия частица-дырка гарантирует, что все возможные состояния те же самые для  $N = 0$  и 6, 1 и 5, 2 и 4. Заполненная наполовину оболочка (задача 12.6) может рассматриваться с точки зрения как частиц, так и дырок. Низшим является терм

$$\begin{aligned} N = 0, 6 & \quad {}^1S_0 \\ N = 1, 5 & \quad {}^2P_{1/2}, {}^2P_{3/2} \\ N = 2, 4 & \quad {}^3P_0, {}^3P_2 \\ N = 3 & \quad {}^4S_{3/2}. \end{aligned} \tag{12.65}$$

Знак расщепления тонкой структуры меняется при заполненной наполовину оболочке: ниже  $N = \Omega/2$  меньшее значение  $J$  идёт вниз (нормальная электронная спин-орбитальная связь), в то время как выше  $N = \Omega/2$  тонкая структура определяется дырками с эффективным противоположным зарядом, поэтому тонкая структура инвертируется.

**12.9. Оболочечная структура**

Как было видно в примерах гармонического осциллятора и кулоновского потенциала, уровни частиц имеют тенденцию группироваться в сгустки с более или менее широкой энергетической щелью между ними. В тех двух исключительных примерах имеется точное вырождение многих орбиталей с очень разными пространственными формами, но с равной энергией. Это вырождение является следствием особых свойств симметрии, что обсуждалось в соответствующих разделах. Однако даже в случаях, где отсутствует точная симметрия, часто можно видеть явную оболочечную структуру с плотностью одночастичных уровней, *модулированной* максимумами (*оболочки*) и минимумами (*энергетические щели между оболочками*).

Появление оболочечной структуры дискретного спектра, вообще говоря, имеет квазиклассический источник в *почти резонансном* соотношении между частотами, отвечающими движению различных степеней свободы. В пределе полного разделения переменных квантовая энергия частицы является суммой парциальных энергий

$$E(n_1, n_2, n_3) = \varepsilon_1(n_1) + \varepsilon_2(n_2) + \varepsilon_3(n_3). \tag{12.66}$$

Оболочка образуется, когда малая вариация, скажем, увеличение на  $\delta n_i$  одного квантового числа может быть с некой точностью скомпенсировано вариацией  $-\delta n_j$  других квантовых чисел так, что полная энергия меня-

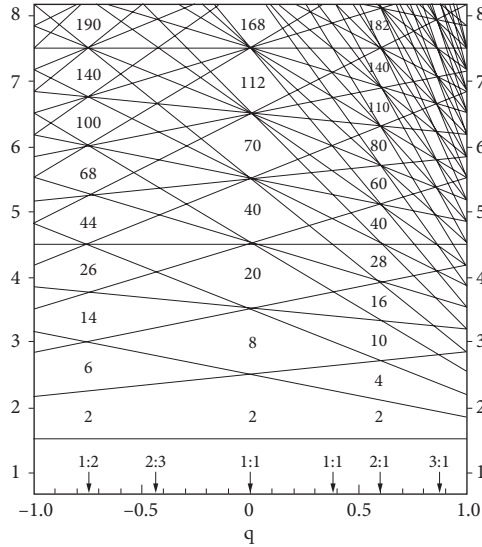


Рис. 12.2. Схема одночастичных уровней в поле анизотропного аксиально-симметричного гармонического осциллятора

ется не очень сильно. Это условие может быть записано для достаточно больших квантовых чисел, когда с парциальными энергиями  $\varepsilon_i(n_i)$  можно приближенно обращаться, как с непрерывными функциями, в виде

$$\frac{d\varepsilon_i}{dn_i} \delta n_i - \frac{d\varepsilon_j}{dn_j} \delta n_j \approx 0. \tag{12.67}$$

Однако в квазиклассической области расстояние  $d\varepsilon/dn = \Delta$  между смежными дискретными уровнями для данной степени свободы равно частоте  $\omega$ , соответствующей периодическому классическому движению с той же энергией, уравнения (I.1.62 и I.15.78). Следовательно, уравнение (12.67) образования оболочки на самом деле является условием приближённого классического резонанса между двумя периодическими движениями:

$$\omega_i \delta n_i \approx \omega_j \delta n_j. \tag{12.68}$$

Для изотропного гармонического осциллятора уравнение (12.68) является точным, поскольку  $\omega_i = \omega_j$ , но оно все еще справедливо приближенно в некотором интервале квантовых чисел в случае слегка различных частот  $\omega_i$  и  $\omega_j$ . Когда частоты различаются сильнее, оболочечная структура размыва-

ется, но она появляется снова в области следующего резонанса, например, при отношении частот, близком к 2:1.

**Задача 12.10**

Нарисовать систему одночастичных уровней для потенциала аксиально-симметричного гармонического осциллятора с различными значениями отношения частот,  $\omega_x/\omega_z = \omega_y/\omega_z \equiv \omega_\perp/\omega_z$ ; сравнить с рис. П.3.2 для двумерного случая.

**Решение.**

Смотрите рис. 12.2, где параметр деформации равен  $q = (\omega_\perp - \omega_z)/\omega_0$ ,  $\omega_0 = (2\omega_\perp + \omega_z)/3$ ; числа показывают максимальное заполнение оболочек. Деформация может быть пересчитана в отношение осей.

**Дополнительная литература:** [10], [39], [69], [70]

Говорят, что вскоре после открытия уравнения Шрёдингера для волновой функции электронов  $\Psi$ , которое блестяще оправдалось для малых систем, таких как He или  $H_2$ , П. М. Дирак объявил конец химии, поскольку всё её содержание описывалось этим великим по силе уравнением. «К сожалению», как говорят, добавил он, «практически во всех случаях сложность этого уравнения не позволяет получить его решение».

*В. Кон. Нобелевская лекция, 1998*

## Глава 13

### Фермионы

#### 13.1. Идеальный Ферми-газ

Точное решение реалистической квантовой задачи для системы многих частиц, взаимодействующих между собой и с внешними полями, невозможно (и было бы бесполезным). Нужны приближённые методы, основанные на эмпирической информации, физических гипотезах и поучительных упрощённых моделях. Более того, вместо точной чрезвычайно сложной волновой функции нам нужно лишь ограниченное количество информации, которая может быть непосредственно связана с наблюдаемыми величинами. Взаимодействие обычно не является слабым, и прямолинейное применение теории возмущений на основе картины независимых частиц не работает. Тем не менее мы начнём с идеального газа невзаимодействующих частиц — этот шаг необходим для того, чтобы подойти к физике реалистических систем со взаимодействиями.

Эта идеализированная картина уже обсуждалась в главе 12 для атомных и ядерных конфигураций. В идеальном Ферми-газе мы имеем  $N$  тождественных фермионов в общем внешнем поле, и нерелятивистский гамильтониан выражается формулой

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^N \left\{ \hat{K}_a + \hat{U}_a \right\} \equiv \sum_{a=1}^N \hat{h}_a. \quad (13.1)$$

Волновые функции системы как целого  $\Psi$  строятся из *одночастичных* функций  $\psi_\lambda$ , удовлетворяющих

$$\hat{h}\psi_\lambda = \varepsilon_\lambda\psi_\lambda. \quad (13.2)$$

Вследствие неразличимости частиц все операторы  $\hat{h}_a$  идентичны. Решение уравнения (13.2) даёт полный ортонормированный набор функций  $\{\psi_\lambda\}$  и их энергии  $\varepsilon_\lambda$ . *Многочастичные* стационарные состояния  $\Psi$  — это слэтеровские детерминанты (или относительно простые их комбинации, имеющие определённые значения интегралов движения), см. гл. 12. Эти состояния соответствуют различным распределениям частиц по одночастичным орбиталям  $\psi_\lambda$ . На языке вторичного квантования мы выбираем  $N$  различных орбиталей  $\psi_\lambda$  и действуем на вакуум  $|0\rangle$   $N$  операторами рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , по одному на каждую из  $N$  выбранных орбиталей. Энергия каждого стационарного состояния даётся суммой (12.3). Основное состояние соответствует заполнению  $N$  низших орбиталей. Мы называем *энергией Ферми* энергию  $\varepsilon_F$  самого высокого из занятых состояний. Если имеются вырожденные состояния с такой энергией, то они образуют *поверхность Ферми*  $\Sigma_F$ .

В простейшем *пространственно однородном* случае потенциал  $\hat{U}_a \rightarrow U(\mathbf{r}_a)$  в (13.1) определяется стенками большого ящика объёма  $V = L^3$  с периодическими граничными условиями, см. разд. I.3.8. Соответствующие орбитали — это плоские волны  $|\lambda\rangle = |\mathbf{p}\sigma\rangle$  с импульсом  $\mathbf{p}$  и проекцией спина  $\sigma$  на произвольную ось квантования

$$\psi_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{r}, s_z) = (\mathbf{r}s_z|\mathbf{p}\sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})} \chi_\sigma(s_z). \quad (13.3)$$

Здесь  $\chi_\sigma(s_z)$  — спиновая функция, а компоненты волнового вектора являются дискретными,  $k_i = p_i/\hbar = (2\pi/L)n_i$ . Одночастичные энергии состояний (13.3)

$$\varepsilon_\lambda \rightarrow \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (13.4)$$

не зависят от  $\sigma$  и от направления  $\mathbf{p}$ .

В *основном состоянии* системы все орбитали (13.3) заняты вплоть до энергии  $\varepsilon_F$ , характеризуемой, в соответствии с (13.4), *импульсом Ферми*  $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$ . В *термодинамическом пределе* большого объёма  $V$  и большого числа частиц  $N$  при фиксированной *плотности*  $n = N/V$  импульс Ферми зависит только от плотности. Число частиц равно числу занятых

орбиталей  $|\mathbf{p}\sigma\rangle$ :

$$N = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma}, \quad n_{\mathbf{p}\sigma} = 1 \text{ если } p \leq p_F \text{ и } 0 \text{ если } p > p_F. \quad (13.5)$$

Переходя к интегрированию со стандартным подсчётом орбиталей (I.3.94), мы имеем для основного состояния

$$N = g \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_{p < p_F} d^3p = \frac{gVp_F^3}{6\pi^2\hbar^3}, \quad (13.6)$$

где  $g$  — число вырожденных внутренних состояний частицы, в нашем случае число проекций спина  $(2s + 1)$ . Занятые орбитали образуют *сферу Ферми* в импульсном пространстве, радиус которой равен

$$p_F = \left( \frac{6\pi^2\hbar^3}{g} \frac{N}{V} \right)^{1/3} = \left( \frac{6\pi^2\hbar^3}{g} n \right)^{1/3}. \quad (13.7)$$

Среднее расстояние между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3} \sim 1/k_F$  определяется волновым вектором  $k_F = p_F/\hbar$ .

Таким же образом мы можем вычислить энергию основного состояния идеального Ферми-газа:

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = gV \int_{p < p_F} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m}, \quad (13.8)$$

или, используя (13.6),

$$E_0 = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} N = \frac{3}{5} \varepsilon_F N. \quad (13.9)$$

Средняя кинетическая энергия частицы  $\bar{\varepsilon} = E_0/N = (3/5)\varepsilon_F$  растёт с плотностью  $\propto n^{2/3}$ . Это согласуется с основанной на соотношении неопределённостей оценкой температуры (9.9), соответствующей наступлению квантовых эффектов в вырожденном газе. Когда плотность возрастает и расстояние между частицами  $r_0 = [3/(4\pi n)]^{1/3}$  уменьшается, энергия взаимодействия обычно увеличивается. Однако кулоновская энергия газа заряженных частиц увеличивается только как  $\propto 1/r_0 \propto n^{1/3}$ , т. е. *медленнее*, чем кинетическая энергия. Вопреки интуиции, плотный кулоновский газ оказывается ближе по своим свойствам к идеальному газу: *относительная* роль взаимодействия убывает.

Во многих приложениях важную роль играет *плотность состояний на поверхности Ферми*  $\nu_F$ . Поскольку любое слабое возмущение Ферми-газа может повлиять только на слой моря Ферми вблизи поверхности (частицы в глубоких состояниях не могут возбуждаться, поскольку соседние места выше по энергии уже заняты), именно  $\nu_F$  определяет, насколько сильным будет отклик газа на возмущение. По стандартному определению (I.3.83), см. также разд. II.11.5, плотность одночастичных состояний есть число таких состояний на единичный интервал энергий (мы также подразумеваем здесь единичный объём)

$$\nu(\varepsilon) = \frac{g}{(2\pi\hbar)^3} p^2 \frac{4\pi dp}{d\varepsilon}, \quad (13.10)$$

где мы проинтегрировали по телесному углу, предполагая изотропный энергетический спектр  $\varepsilon(p)$ . Для  $\varepsilon(p) = p^2/2m$  мы получаем

$$\nu_F \equiv \nu(\varepsilon_F) = \frac{gm}{2\pi^2\hbar^3} p_F, \quad (13.11)$$

или, сравнивая с выражением (13.6) для плотности  $n = N/V$ , мы приходим к плотности состояний на единичный объём

$$\nu_F = \frac{3mn}{p_F^2} = \frac{3n}{2\varepsilon_F}. \quad (13.12)$$

### Задача 13.1

Рассмотрите атомное ядро ( $Z$  протонов и  $N$  нейтронов) в модели Ферми-газа. Покажите, что нейтрон-протонный дисбаланс  $N - Z$  имеет своей ценой *энергию симметрии*, пропорциональную  $T_3^2/A$ , где  $T_3$  — проекция изоспина (10.11),  $A = N + Z$  — массовое число, и мы предполагаем  $|N - Z|/A \ll 1$ . Выразите коэффициент пропорциональности через энергию Ферми  $\varepsilon_F$  симметричного ядра ( $N = Z$ ).

#### Решение.

Полная кинетическая энергия нейтронного и протонного Ферми-газов есть

$$E_N + E_Z = \bar{\varepsilon}_n N + \bar{\varepsilon}_p Z \quad (13.13)$$

в терминах кинетических энергий нуклонов. Из (13.9)

$$E_N + E_Z = \text{const} \cdot \left\{ N \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} + Z \left( \frac{Z}{V} \right)^{2/3} \right\} = \text{const} \cdot \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{2/3}}, \quad (13.14)$$

поскольку объём ядра пропорционален числу нуклонов  $A$ . Энергия (13.13) минимальна при  $N = Z = A/2$ . Изменение энергии при избытке нейтронов равно

$$E_{\text{symm}} = E_N + E_Z - 2E_{A/2} = \frac{\text{const}}{A^{2/3}} \left[ N^{5/3} + Z^{5/3} - 2 \left( \frac{A}{2} \right)^{5/3} \right], \quad (13.15)$$

или, вводя изоспин  $2T_3 = Z - N$ ,  $|T_3| \ll A$ ,

$$E_{\text{symm}} = \frac{\text{const}}{A^{2/3}} \left[ \left( \frac{A}{2} - T_3 \right)^{5/3} + \left( \frac{A}{2} + T_3 \right)^{5/3} - 2 \left( \frac{A}{2} \right)^{5/3} \right] \propto \frac{T_3^2}{A}. \quad (13.16)$$

Собирая коэффициенты, находим

$$E_{\text{symm}} = \frac{4}{3} \varepsilon_F \frac{T_3^2}{A} = \varepsilon_F \frac{(N - Z)^2}{3A}. \quad (13.17)$$

В действительности этот эффект объясняет только около половины энергии симметрии; остальное происходит от нуклонных взаимодействий, зависящих от изоспина, которые сильнее для нейтрон-протонных пар с  $T = 0$ , чем для пар одинаковых частиц ( $T = 1$ ).

### Задача 13.2

Найдите корреляционную функцию плотностей в различных точках для идеального Ферми-газа в ящике.

#### Решение.

Оператор плотности для данной проекции спина записывается как

$$\hat{N}_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma} \quad (13.18)$$

(ср. с (11.42)), так что среднее значение полной плотности в основном состоянии Ферми-газа есть

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{N}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{N}{V} \equiv n, \quad (13.19)$$

причём каждая спиновая компонента даёт вклад  $n/(2s+1)$ . Корреляционная функция плотности содержит

$$K(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2) = \langle \hat{N}_{\mathbf{r}_1\sigma_1} \hat{N}_{\mathbf{r}_2\sigma_2} \rangle, \quad (13.20)$$

или

$$K(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2) = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} e^{i[(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}_1+(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{r}_2]} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_3\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_4\sigma_2} \rangle, \quad (13.21)$$

как это было бы и для различимых частиц. Для разных проекций спина  $\sigma_1 \neq \sigma_2$  матричный элемент в (13.21) задаёт  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1$ ,  $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_3$ , и корреляция плотности отсутствует:

$$K(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2 \neq \sigma_1) = \frac{1}{V^2} \left( \frac{N}{2s+1} \right)^2 = \frac{n^2}{(2s+1)^2}. \quad (13.22)$$

Корреляции появляются при  $\sigma_2 = \sigma_1 \equiv \sigma$ . Теперь есть два случая, когда матричный элемент отличен от нуля: первый,  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1$ ,  $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_3$ , приводит к предыдущему нескоррелированному результату (13.22), тогда как вторая возможность,  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$ ,  $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$ , определяет

$$K(\mathbf{r}_1\sigma; \mathbf{r}_2\sigma) = \frac{n^2}{(2s+1)^2} + \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} n_{\mathbf{k}_1\sigma}(1-n_{\mathbf{k}_2\sigma}). \quad (13.23)$$

В корреляционном члене уравнения (13.23) сумма по  $\mathbf{k}_1$  берётся по занятым состояниям  $k_1 < k_F$ , тогда как сумма по пустым состояниям  $\mathbf{k}_2$  даёт ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ )

$$\left( \sum_{\mathbf{k}_2} - \sum_{k_2 < k_F} \right) e^{i(\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r})}. \quad (13.24)$$

Полная сумма по  $\mathbf{k}_2$  равна  $V\delta(\mathbf{r})$ , так что

$$K(\mathbf{r}_1\sigma; \mathbf{r}_2\sigma) = \left( \frac{n}{2s+1} \right)^2 + \frac{n}{2s+1} \delta(\mathbf{r}) - \left( \frac{I(r)}{V} \right)^2, \quad (13.25)$$

где

$$I(r) = \sum_{k < k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} = \int_{k < k_F} \frac{Vd^3k}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}, \quad (13.26)$$

и интегрирование приводит к

$$I(r) = \frac{V}{2\pi^2 r^3} [\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)]. \quad (13.27)$$

Таким образом, результат для корреляционной функции (ср. с (11.52))

$$C(\mathbf{r}_1\sigma, \mathbf{r}_2\sigma) \equiv K(\mathbf{r}_1\sigma, \mathbf{r}_2\sigma) - \left(\frac{n}{2s+1}\right)^2 \quad (13.28)$$

есть ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ):

$$C(\mathbf{r}\sigma) = -\frac{n}{2s+1} \delta(\mathbf{r}) - \frac{[\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)]^2}{4\pi^4 r^6}. \quad (13.29)$$

Корреляция всегда отрицательна, как и следовало ожидать по принципу Паули (так называемая *корреляционная дырка*), но она быстро убывает на больших расстояниях, рис. 13.1; осцилляции показывают интерференционную картину с характерной длиной волны  $1/k_F$  порядка среднего расстояния между частицами. Обратите внимание, что нетривиальные корреляции появляются только из-за обменных эффектов между частицами с параллельными спинами.

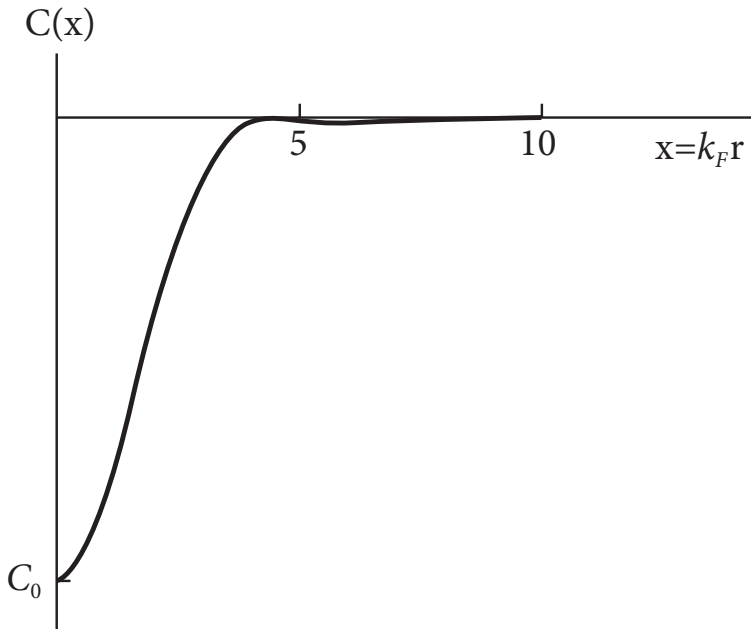


Рис. 13.1. Корреляционная функция плотностей для фермионов с одинаковыми проекциями спина;  $x = k_F r > 0$ ;  $C_0 = 4\pi^4 k_F^6$

### 13.2. Спиновый парамагнетизм

Когда на Ферми-газ действует внешнее поле, основное состояние перестраивается так, чтобы минимизировать энергию в новых обстоятельствах. В качестве примера рассмотрим, как электронные спины ведут себя в постоянном магнитном поле.

При отсутствии магнитного поля минимум энергии соответствует равным числам  $N_{\pm}$  электронов с проекциями спинов  $s_z = \pm 1/2$ . (Подобным образом энергетически наиболее выгодная ситуация по отношению к изо-спину достигается при равном числе протонов и нейтронов, см. задачу 13.1. Частицы с обоими проекциями спинов занимают одинаковые сферы Ферми,

$$n_+ = n_- = \frac{n}{2} = \frac{p_F^3}{6\pi^2\hbar^3}. \quad (13.30)$$

Энергии Ферми равны

$$\varepsilon_F^{(+)} = \varepsilon_F^{(-)} = \frac{p_F^2}{2m}. \quad (13.31)$$

В присутствии магнитного поля  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$  мы должны учесть дополнительную энергию взаимодействия спинов ( $g_s = -|e|\hbar/mc$ ) с полем

$$-(\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{B}}) = -g_s \hbar s_z \mathcal{B} = \pm \mu_B \mathcal{B}. \quad (13.32)$$

Одночастичные энергии для двух проекций спина раздвигаются

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} \rightarrow \varepsilon_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \frac{p^2}{2m} \pm \mu_B \mathcal{B}. \quad (13.33)$$

При данном импульсе энергия одной проекции спина превосходит энергию другой на  $2\mu_B \mathcal{B}$ . Однако в минимуме полной энергии наибольшие энергии для обеих проекций должны быть одинаковы, поскольку в противном случае было бы выгодно перевести частицы из группы с большей энергией в группу с меньшей. Поэтому основное состояние характеризуется условием

$$\varepsilon_F^{(+)} = \frac{p_F^{(+)^2}}{2m} + \mu_B \mathcal{B} = \varepsilon_F^{(-)} = \frac{p_F^{(-)^2}}{2m} - \mu_B \mathcal{B}, \quad (13.34)$$

или

$$\frac{p_F^{(+)^2}}{2m} + 2\mu_B \mathcal{B} = \frac{p_F^{(-)^2}}{2m}. \quad (13.35)$$

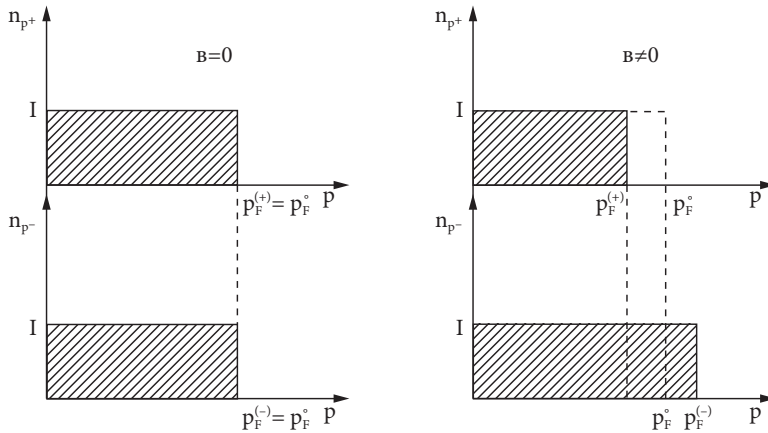


Рис. 13.2. Смещение поверхностей Ферми для двух проекций спина в магнитном поле

Таким образом, две поверхности Ферми в импульсном пространстве расщепляются, и в основном состоянии  $N_+ < N_-$ . Смещение в слабом магнитном поле (рис. 13.2)

$$\frac{p_F^{(+)^2} - p_F^{(-)^2}}{2m} = \frac{(6\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m} \left( n_+^{2/3} - n_-^{2/3} \right) \quad (13.36)$$

может быть вычислено из (13.35). В слабом поле смещение мало по сравнению с невозмущённой энергией Ферми. Мы можем положить, подобно (13.16),

$$n_+ = \frac{n}{2} (1 - x), \quad n_- = \frac{n}{2} (1 + x), \quad (13.37)$$

и разлагать по степеням  $x$  (ср. с (13.17)):

$$\begin{aligned} \frac{p_F^{(+)^2} - p_F^{(-)^2}}{2m} &= \frac{(6\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m} \left( \frac{n}{2} \right)^{2/3} \left[ (1 - x)^{2/3} - (1 + x)^{2/3} \right] \\ &\approx -\frac{4}{3} x \frac{(3\pi^2 n)^{2/3} \hbar^2}{2m} = -\frac{4}{3} x \varepsilon_F, \end{aligned} \quad (13.38)$$

где  $\varepsilon_F$  — нормальная энергия Ферми-газа с полной плотностью  $n$  без магнитного поля. Отсюда и из уравнения (13.35)

$$x = \frac{3}{2} \frac{\mu_B \mathcal{B}}{\varepsilon_F}; \quad (13.39)$$

практически всегда эта величина весьма мала.

Результат (13.39) определяет магнитный момент системы (для единичного объёма)

$$\mu = \mu_B(n_- - n_+) = \mu_B n x = \mu_B^2 \frac{3n}{2\varepsilon_F} \mathcal{B}. \quad (13.40)$$

Мы получили *парамагнетизм Паули* — частичное выстраивание спинов в магнитном поле и нашли *парамагнитную спиновую восприимчивость*

$$\chi_s = \frac{\partial \mu}{\partial \mathcal{B}} = \mu_B^2 \frac{3n}{2\varepsilon_F}. \quad (13.41)$$

Уравнение (13.12) для плотности состояний на поверхности Ферми позволяет записать эту величину как

$$\chi_s = \mu_B^2 \nu_F. \quad (13.42)$$

### Задача 13.3

Покажите, что результат в виде (13.42) является универсальным — не зависит от энергетического спектра невозмущённого газа  $\varepsilon(p)$ .

#### Решение.

Энергетический слой, на который влияет поле  $\mathcal{B}$  —  $\Delta\varepsilon \sim \mu_B \mathcal{B}$ . Две поверхности Ферми расщепляются на  $\Delta\varepsilon \sim \mu_B \mathcal{B}$ . Число состояний каждого спина в этом слое на единичный объём есть

$$\Delta n = (1/2)\nu_F \Delta\varepsilon = \mu_B \nu_F \mathcal{B}. \quad (13.43)$$

Магнитный момент равен

$$\mu = \mu_B \Delta n = \mu_B^2 \nu_F \mathcal{B}, \quad (13.44)$$

что эквивалентно (13.42).

### 13.3. Орбитальный диамагнетизм

Орбитальное движение электронов в вырожденном Ферми-газе квантуется, что подробно обсуждалось в гл. I.13. В среднем энергия каждого уровня Ландау увеличивается на энергию нулевых колебаний  $\hbar\omega_c/2$  с циклотронной частотой  $\omega_c = |e|\mathcal{B}/mc$ . Поэтому влияние магнитного поля на

орбитальное движение должно быть *диамагнитным*, энергия системы увеличивается, в отличие от парамагнитного эффекта выстраивания спинов, уменьшающего энергию системы.

Полная орбитальная энергия в статическом однородном магнитном поле  $\mathcal{B}$  есть энергия занятых уровней Ландау. В слабом поле  $\mu_B \mathcal{B} \ll \varepsilon_F$  внутри поверхности Ферми находится очень много уровней Ландау. Поскольку магнитное поле нечётно по отношению к обращению времени, положение энергии Ферми может измениться только во втором порядке по  $\mathcal{B}$ . Это означает, что сдвиг мал по сравнению с расстояниями между уровнями и им можно пренебречь. В основном состоянии мы занимаем уровни Ландау и соответствующие состояния продольного движения вплоть до  $\varepsilon_F$ , и полная энергия на единичный объём может быть записана как

$$E = 2 \frac{|e| \mathcal{B}}{(2\pi \hbar)^2 c} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_n \theta(\varepsilon_F - \varepsilon(n, p_z)) \varepsilon(n, p_z), \quad (13.45)$$

где одночастичная энергия (I.13.61) описывается формулой

$$\varepsilon(n, p_z) = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}, \quad (13.46)$$

и мы учли вырождение (I.13.62) каждого уровня Ландау, добавив множитель 2 для проекций спина. Функция  $\theta(y)$  в (13.45) — обычная ступенька, равная 1 при  $y > 0$  и 0 при  $y < 0$ .

С ростом величины  $\mathcal{B}$  увеличиваются также циклотронная частота и вместимость уровней. Поэтому уровни Ландау пересекают поверхность Ферми  $\Sigma_F$  один за другим и становятся пустыми, тогда как частицы распределяются по оставшимся уровням ниже  $\Sigma_F$ , которые увеличивают свою вместимость. После каждого пересечения  $\Sigma_F$  число занятых уровней уменьшается на 1, и вся картина приблизительно повторяется, потому что полное число занятых уровней всё ещё огромно. Поэтому энергия системы приближённо *периодична* как функция  $\varepsilon_F / \hbar \omega_c$ , или обратного магнитного поля. Это так называемый *эффект де Гааза—ван Альфена*. Ниже мы вычислим *регулярную* часть орбитального магнетизма, соответствующую усреднению по этим осцилляциям. Относительное изменение магнитного поля между двумя перестройками  $\delta \mathcal{B} / \mathcal{B} \simeq \hbar \omega_c / \varepsilon_F$ .

Усреднение, которое выделяет регулярную (монотонную) часть магнитного отклика, может быть произведено путём замены дискретной суммы по  $n$  в уравнении (13.45) на интеграл с помощью формулы суммирования Эйлера—Маклорена, разд. II.13.7. Вместо (II.13.90) мы получаем с нижним

пределом  $a$

$$\int_a^\infty dx f(x) \approx \frac{1}{2} f(a) + \sum_{n=1}^\infty f(n+a) + \frac{1}{12} f'(a). \quad (13.47)$$

Теперь, беря  $a = 1/2$  и дополняя интеграл в (13.47) куском от 0 до  $1/2$  (внутри этого интервала мы можем интерполировать  $f(x) \approx f(0) + xf'(0)$ ), мы приводим эту формулу к удобному виду

$$\sum_{n=0}^\infty f(n+1/2) \approx \int_0^\infty dx f(x) + \frac{1}{24} f'(0). \quad (13.48)$$

### Задача 13.4

Определяя орбитальную магнитную восприимчивость  $\chi_{\text{orb}}$  как в формуле (I.24.63), вычислите её величину для Ферми-газа [71, §59].

#### Решение.

Используем формулу суммирования (13.48) в выражении (13.45) для энергии. Член с интегралом в (13.48) даёт часть энергии, которая не зависит от магнитного поля. Весь эффект происходит от поправочного члена  $(1/24)f'(0)$ , т. е. от возникновения *квантованного дискретного спектра*. Этот член легко вычислить прямым интегрированием по  $p_z$ ; производная от  $\theta(y)$  есть  $\delta(y)$ . Этот член даёт

$$E^{(2)} = -\frac{1}{2} \chi_{\text{orb}} \mathcal{B}^2, \quad (13.49)$$

где *диамагнитная восприимчивость* равна

$$\chi_{\text{orb}} = -\frac{1}{3} \mu_B^2 \nu_F \quad (13.50)$$

со стандартным выражением (13.12) для плотности состояний  $\nu_F$  на поверхности Ферми без магнитного поля.

Таким образом, орбитальный диамагнетизм (*Ландау, 1930*) Ферми-газа равен  $-1/3$  от спинового парамагнетизма (*Паули, 1927*). Полный результат

$$\chi = \chi_s + \chi_{\text{orb}} = +\frac{2}{3} \mu_B^2 \nu_F, \quad (13.51)$$

является парамагнитным. Существование диамагнитных металлов связано главным образом с тем фактом, что орбитальное движение электронов

в металле имеет энергетический спектр, где масса электрона заменяется на *эффективную массу*. Если эта масса мала по сравнению с нормальной массой электрона, то циклотронная частота увеличивается вместе с отрицательной орбитальной восприимчивостью; спиновый парамагнетизм содержит голую массу электрона.

### 13.4. Вводим среднее поле

В реалистических системах частицы взаимодействуют. Если радиус взаимодействия  $R$  не очень мал, в многочастичной системе на каждую частицу эффективно воздействуют по крайней мере несколько других частиц. Характерным параметром является отношение  $R/r_0 \sim Rn^{1/3}$  радиуса сил к среднему расстоянию между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3}$ , где  $n$  — плотность частиц. Если этот параметр велик или по крайней мере порядка единицы, изменение движения одной частицы не приводит к радикальному изменению сил в данном месте. Такая ситуация приближённо реализуется в твёрдых телах, а также в сложных атомах и ядрах.

Мы приходим к идее *эффективного поля*, которое в среднем управляет движением частиц. Эффективное поле производится внешним полем (если оно приложено) и *средним полем* всех остальных частиц. Мы будем искать среднее поле, которое даёт наилучшее приближение к истинному квантовому состоянию многочастичной системы. Оптимальные одночастичные состояния  $|\lambda\rangle$  являются собственными состояниями этого поля. С другой стороны, занимая низшие состояния  $|\lambda\rangle$ , мы получаем слэтеровский детерминант в качестве волновой функции  $|\Psi\rangle$  всей системы. Если среднее поле найдено правильно, то частицы движутся в состоянии  $|\Psi\rangle$  таким образом, что создаваемое ими поле в среднем совпадает с исходным эффективным полем, которое, следовательно, является *самосогласованным*.

Простейшая версия самосогласованного поля может быть найдена с помощью *приближения Хартри*. Хотя пробная волновая функция  $|\Psi\rangle$  даётся слэтеровским детерминантом и поэтому удовлетворяет требованиям статистики Ферми, мы пренебрегаем влиянием антисимметрии на энергию. Например, рассмотрим атом с зарядом ядра  $Z$  и  $N$  электронами (для иона  $N \neq Z$ ). Нерелятивистский гамильтониан электронов даётся выражением

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{a=1}^N \nabla_a^2 - Ze^2 \sum_{a=1}^N \frac{1}{r_a} + \frac{e^2}{2} \sum_{a,b(a \neq b)}^N \frac{1}{r_{ab}}. \quad (13.52)$$

Самосогласованное поле  $\tilde{U}$ , дающее приближение к многочастичному гамильтониану (13.52), формируется полем ядра и средним полем пространственного заряда электронов:

$$\tilde{U}(\mathbf{r}_a) = -\frac{Ze^2}{r_a} + \sum_{b(\neq a)} \int d^3r_b \frac{\rho_b(\mathbf{r}_b)}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}. \quad (13.53)$$

Теперь мы предположим, что одночастичные электронные волновые функции удовлетворяют уравнению Шрёдингера в этом поле:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{U}(\mathbf{r}) - \varepsilon \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (13.54)$$

Уравнение Хартри (13.54) даёт орбитали  $\psi_\lambda(\mathbf{r})$  с энергиями  $\varepsilon_\lambda$ . Теперь мы должны удовлетворить условию самосогласованности: плотность заряда равна  $\rho_b = e|\psi_b(\mathbf{r}_b)|^2$ , и сумма по занятым орбиталям  $b$  должна опять дать потенциал  $\tilde{U}$  (13.53). На практике можно начать с правдоподобного анзаца  $U^{(0)}$  для поля и после нахождения орбиталей в этом поле прийти к потенциалу  $U^{(1)}$ . Если он отличается от  $U^{(0)}$ , мы делаем следующую итерацию: решаем одночастичную задачу с этим новым потенциалом, находим подправленные орбитали и вычисляем следующее приближение  $U^{(2)}$ . Обычно после нескольких итераций потенциал воспроизводит себя.

Строго говоря, эффективное поле (13.53), действующее на данный электрон, зависит от состояния рассматриваемого электрона, и нет единственного общего потенциала  $\tilde{U}$ . Однако в многочастичных системах общий потенциал может быть хорошим приближением. Таким образом, в сложных атомах можно использовать потенциал *экранированного* заряда ядра

$$\tilde{U}(r) = -\frac{e^2}{r} \tilde{Z}(r), \quad (13.55)$$

где *эффективный заряд*  $\tilde{Z}(r)$  зависит от расстояния до ядра, как показано на рис. 13.3. На малых расстояниях  $\tilde{Z}(r) \rightarrow Z$  (нет экранирования, чистый заряд ядра), тогда как на больших расстояниях электрон находится в поле остаточного заряда  $\tilde{Z}(r) \rightarrow z = Z - (N - 1)$ ; для нейтральных атомов  $z = 1$ .

Мы можем качественно заключить, что самые глубокие атомные орбиты похожи на водородоподобные с зарядом  $Z$ , тогда как внешние орбиты близки к водородным. Таким образом, внешний радиус электронного облака всегда близок к боровскому радиусу атома водорода. Решения уравнения Хартри (13.54) имеют обычные водородоподобные квантовые числа  $n\ell m_\ell$ ,

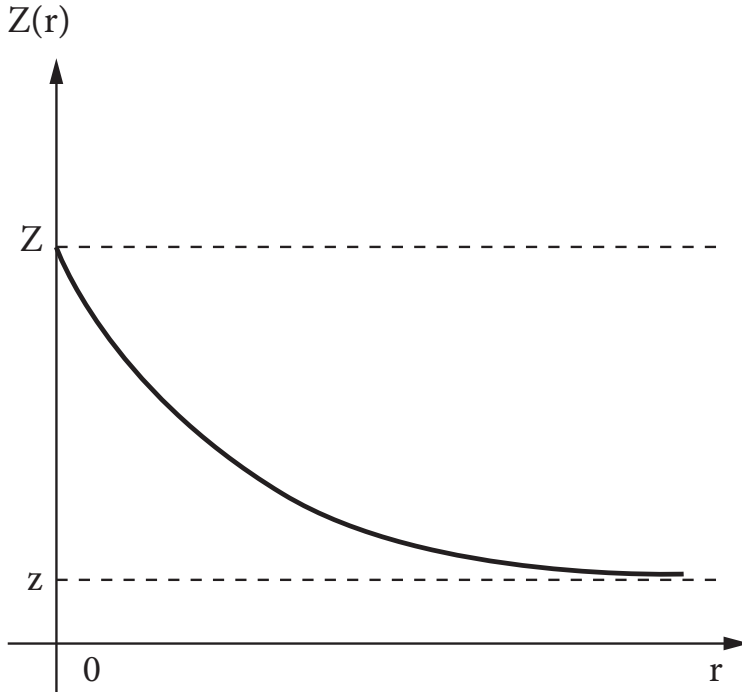


Рис. 13.3. Эффективный заряд, обусловленный электронным экранированием

однако кулоновского вырождения больше нет. Одночастичные энергии могут быть выражены как

$$\varepsilon_{nl} = -\frac{1}{2n^2} \frac{e^2}{a} Z_{nl}, \quad (13.56)$$

где  $Z_{nl}$  показывает отличие от спектра водородоподобного атома, обусловленное экранированием. Параметр  $Z_{nl}$  принимает значения между  $z$  и  $Z$ , убывая с ростом  $n$  и  $\ell$ .

### 13.5. Статистическая модель

В Ферми-системе с достаточно большим числом частиц большинство частиц из-за принципа Паули занимают орбитали с большими квантовыми числами. Эти состояния можно описывать *квазиклассически*. В этом случае можно построить статистическую версию метода среднего поля, *прибли-*

*жение Томаса–Ферми.* Применяя такой метод к конечной системе, такой, как сложный атом, ядро или атомы в ловушке, мы не можем надеяться описать детали оболочечной структуры. Цель этого подхода — описание *усреднённых свойств* системы.

Посмотрим, как можно применить такой подход к тяжёлым атомам. Главная идея состоит в том, чтобы использовать среднюю *локальную плотность* электронного облака, сравните с разд. I.3.9. В тяжёлом атоме эта плотность велика везде, кроме периферийной области, и *гладко* меняется как функция расстояния до центра (для простоты мы предполагаем сферическую симметрию). Поскольку квазиклассические волновые функции электронов локально характеризуются некоторой длиной волны (вспомните разд. 9.1), мы можем приписать им локальный классический импульс  $\mathbf{p}(r)$ . В каждом месте низшая энергия достигается при локальном распределении Ферми, характеризуемом локальным импульсом Ферми  $p_F(r)$ , который связан с местной плотностью обычным образом ((13.6) с  $g = 2$ ):

$$n(r) = \frac{p_F^3(r)}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (13.57)$$

Локальная энергия Ферми  $\varepsilon_F$  не может зависеть от координат, потому что тогда состояние системы не было бы стационарным, ток перераспределил бы электроны в области с меньшими  $\varepsilon_F$  и уменьшил энергию. В равновесии, подобно уравнениям (I.3.100) и (13.34),

$$\varepsilon_F = U(r) + \frac{p_F^2(r)}{2m} = \text{const}. \quad (13.58)$$

Здесь  $U(r)$  — потенциал среднего поля, который мы и ищем. Он связан с локальной плотностью (13.57) как

$$n(r) = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} [\varepsilon_F - U(r)]^{3/2}. \quad (13.59)$$

Чтобы потенциал  $U(r)$  был самосогласованным, мы должны решить уравнение Пуассона с плотностью заряда, образованной точечным ядром с зарядом  $Ze$  и электронным облаком с плотностью  $\rho_e(r) = -en(r)$ :

$$\nabla^2 U = \nabla^2(-e\varphi) = 4\pi e[Ze\delta(\mathbf{r}) - en(r)]. \quad (13.60)$$

Вследствие сферической симметрии мы получаем при  $r \neq 0$ :

$$\nabla^2 U(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) U(r) = -4\pi e^2 n(r) = -\frac{4e^2(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} [\varepsilon_F - U(r)]^{3/2}. \quad (13.61)$$

Удобно упростить это уравнение переходом к безразмерным переменным. Заряд ядра определяет граничное условие в начале координат,

$$U(r) \rightarrow -\frac{Ze^2}{r}, \quad r \rightarrow 0. \quad (13.62)$$

Вводим новую функцию  $\chi(r)$  как

$$\varepsilon_F - U(r) = \frac{Ze^2}{r} \chi(r), \quad (13.63)$$

так что

$$\chi(r) \rightarrow 1, \quad r \rightarrow 0. \quad (13.64)$$

Тогда уравнение (13.61) может быть переписано как

$$Ze^2 \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) \frac{\chi}{r} = \frac{Ze^2}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2} = \frac{4e^2(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} \left( \frac{Ze^2}{r} \chi \right)^{3/2}, \quad (13.65)$$

или

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} = \frac{4 \cdot 2^{3/2}}{3\pi} \left( \frac{me^2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{r/Z}} = \left[ \frac{2^{7/3}}{(3\pi)^{2/3}} \right]^{3/2} \frac{\chi^{3/2}}{a^{3/2} \sqrt{r/Z}}. \quad (13.66)$$

Наконец, мы вводим безразмерную координату  $x$ ,

$$r = aZ^{-1/3}bx, \quad b = \left[ \frac{2^{7/3}}{(3\pi)^{2/3}} \right]^{-1} \approx 0,885, \quad (13.67)$$

где  $a$  — боровский радиус, и сводим задачу к универсальному (не содержащему параметров) уравнению Томаса—Ферми

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}. \quad (13.68)$$

Чтобы решить это нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка, нам нужно, кроме условия в начале координат (13.64), определить

второе граничное условие. Если существует внешняя граница атома  $r = R$ , где  $n(R) = 0$ , то на этой поверхности  $U(R) = \varepsilon_F$ . Снаружи поле должно совпадать с кулоновским полем полного заряда  $Z - N$ , где  $N$  — число электронов. Это ведёт к граничному условию

$$\left[ \frac{dU}{dr} \right]_{r \rightarrow R} = -\frac{(Z - N)e^2}{R^2}. \quad (13.69)$$

Для функции  $\chi$  (13.63) это значит

$$\chi(X) = 0, \quad x \left[ \frac{d\chi}{dx} \right]_{x \rightarrow X} = -\frac{Z - N}{Z}, \quad X = \frac{R}{a} \frac{Z^{1/3}}{b}. \quad (13.70)$$

### Задача 13.5

Докажите, что граничное условие (13.70) обеспечивает правильную нормировку полного заряда электронов,

$$\int_{r \leq R} d^3r n(r) = N. \quad (13.71)$$

Для *нейтрального атома*,  $Z = N$ , потенциал  $U(R) = 0$ , и потому модель потребовала бы  $\varepsilon_F = 0$ . Все электроны имеют меньшие, т. е. отрицательные, энергии, будучи связаны в атоме. Теперь из (13.68) и (13.70) следует, что при некотором конечном значении  $x = X$  функция  $\chi(x)$  и все её производные обращаются в нуль, так что единственное подходящее решение есть  $\chi \equiv 0$ . Это значит, что нетривиальное решение, описывающее нейтральный атом в модели Томаса—Ферми, невозможно при конечном значении  $R$ , и радиус атома  $R$  *бесконечен*. Функция  $\chi$  асимптотически убывает к нулю как

$$\chi(x) = \frac{144}{x^3}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (13.72)$$

Согласно (13.59), это соответствует асимптотическому поведению плотности  $n \propto r^{-6}$ . В то же время радиус *положительных ионов*,  $Z > N$ , конечен. Однако модель не предсказывает стабильных *отрицательных ионов*. Действительно, при  $Z < N$  наклон  $d\chi/dx$  положителен на границе, тогда как решение внутренней задачи ( $r < R$ ) определённо даёт отрицательный наклон, поскольку плотность убывает, стремясь к нулю на поверхности.

Главное достоинство этой сильно упрощённой модели состоит в её общих качественных предсказаниях. Для всех нейтральных атомов уравнение То-

маса—Ферми и граничные условия универсальны. Поэтому мы приходим к типичному распределению электронов, которое меняется от одного атома к другому простым *масштабированием*. Из (13.67) следует, что характерный параметр длины порядка  $aZ^{-1/3}$ , так что размер области, которая содержит основную часть электронного заряда, зависит от ядерного заряда как  $\propto Z^{-1/3}$ . Как мы уже заметили, самые внутренние электроны находятся на расстоянии порядка  $a/Z$ , тогда как самые внешние на расстоянии  $\sim a$ .

### Задача 13.6

Оцените среднюю скорость электронов и энергию полной ионизации атома в модели Томаса—Ферми.

**Решение.**

$$\frac{\bar{v}}{c} \sim \alpha Z^{1/3}, \quad E_{\text{ион}} \sim Z^{7/3} \text{ Ry}. \quad (13.73)$$

Приближение Томаса—Ферми даёт разумные оценки для средней электронной плотности; его можно также обобщить, учтя обменные и релятивистские эффекты. Тем не менее, его область применимости весьма ограничена. В нём потеряна оболочечная структура атома; она заменяется на модель *капли* с гладкой плотностью заряда, так что мы не можем изучать отдельные электронные состояния. Лучше всего модель применима для атомов инертных газов с полностью заполненными оболочками, тогда как для периферийных орбит валентных электронов она недостаточна. Близкая по духу *модель жидкой капли* используется для описания макроскопических свойств сложных ядер; как и для атомов, она должна быть дополнена учётом оболочечной структуры.

### 13.6. Экранирование в электронном газе

Мы можем применить подход Томаса—Ферми к большой однородной электронной системе. Это может быть модель электронной плазмы или электронов в металле, см. также разд. 13.9. Мы предполагаем нулевую температуру, поскольку температура вырождения электронов в металлах очень высока ( $1 \text{ эВ} = 11600 \text{ К}$ ). Электростатическая стабильность системы достигается компенсирующим положительно заряженным фоном, моделирующим ионную решётку. В равновесии система имеет постоянную электронную плотность  $n(r) = n$ , выражающуюся стандартной формулой (13.6) Ферми-газа.

Поместим внешний точечный заряд  $e_0$  в начале координат. (Это может быть примесь, вакансия или флуктуация ионного фона.) В зависимости от

знака  $e_0$  в его окрестности появится избыток или недостаток электронной плотности в ответ на нарушение электростатического равновесия. Новое пространственно неоднородное распределение электронов  $n(r)$  вместе с внешним зарядом порождает электростатический потенциал  $\varphi(r)$ , удовлетворяющий уравнению Пуассона:

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi \{e_0 \delta(\mathbf{r}) - e[n(r) - n]\}. \quad (13.74)$$

Потенциал, действующий на электрон, есть  $-e\varphi(r)$ , так что уравнение согласования (13.61) принимает вид (при  $r \neq 0$ )

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4e(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} \{[\varepsilon_F + e\varphi(r)]^{3/2} - \varepsilon_F^{3/2}\}. \quad (13.75)$$

Для малого возмущения, вызванного внешним зарядом,  $|e\varphi| \ll \varepsilon_F$ ,

$$\nabla^2 \varphi \approx \frac{2e^2(2m)^{3/2}}{\pi\hbar^3} \sqrt{\varepsilon_F} \varphi, \quad (13.76)$$

и, выражая энергию Ферми через невозмущённую плотность  $n$ ,

$$\nabla^2 \varphi = \frac{2e^2(2m)^{3/2}(3\pi^2 n)^{1/3}}{\pi\sqrt{2m}} \varphi = \frac{4\pi n e^2}{m} \frac{3m^2}{p_F^2} \varphi. \quad (13.77)$$

Величина

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}} \quad (13.78)$$

является классической *плазменной частотой* (II.15.37), которая характеризует отклик плазмы на локальное нарушение электронейтральности. Любая локальная неравновесная плотность заряда  $\delta\rho$  генерирует ток  $\delta\mathbf{j}$  по уравнению непрерывности

$$\frac{\partial(\delta\rho)}{\partial t} = -\text{div}(\delta\mathbf{j}). \quad (13.79)$$

Электронный ток  $\delta\mathbf{j} = -ne\delta\mathbf{v}$  самосогласованно поддерживается электрическим полем

$$m \frac{d(\delta\mathbf{v})}{dt} = -e(\delta\vec{\mathcal{E}}), \quad (13.80)$$

которое, в свою очередь, создаётся той же самой флуктуацией заряда  $\text{div}(\delta\vec{\mathcal{E}}) = 4\pi(\delta\rho)$ . В результате локальная флуктуация ведёт к осцилляциям

плотности заряда

$$\frac{\partial^2(\delta\rho)}{\partial t^2} = -\frac{4\pi ne^2}{m}(\delta\rho) = -\omega_0^2(\delta\rho) \quad (13.81)$$

с электронной плазменной частотой (13.78).

Согласно (13.77), возмущение потенциала удовлетворяет ( $v_F = p_F/m$  — скорость на  $\Sigma_F$ )

$$\nabla^2\varphi = 3\frac{\omega_0^2}{v_F^2}\varphi. \quad (13.82)$$

Решение этого уравнения, убывающее на бесконечности и переходящее в потенциал  $e_0/r$  заряда  $e_0$  в начале координат, есть

$$\varphi(r) = \frac{e_0}{r}e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{3}\frac{\omega_0}{v_F}. \quad (13.83)$$

Статический внешний заряд *экранируется* подвижными электронами, вспомните задачу I.1.8. Радиус экранирования равен

$$r_p = \frac{1}{\kappa} = \frac{v_F}{\sqrt{3}\omega_0}. \quad (13.84)$$

Это характерная длина смещения электронов в среде, необходимая, чтобы сбалансировать внешний заряд и восстановить равновесие (*поляризационная длина*). Возмущение в электронном газе распространяется на это расстояние за время порядка периода плазменных колебаний.

### 13.7. Приближение Хартри–Фока

Сравнивая метод Хартри из разд. 13.4 с соображениями из разд. 12.4, 12.5, мы видим, что потеряли обменные эффекты. Мы можем попытаться включить их в концепцию среднего поля; в результате получится *метод Хартри–Фока*.

Рассмотрим общий фермионный гамильтониан с двухчастичным взаимодействием:

$$\hat{H} = \sum_a (\hat{K}_a + \hat{U}_a) + \frac{1}{2} \sum_{ab(a \neq b)} \hat{V}_{ab} \equiv \sum_a \hat{h}_a + \frac{1}{2} \sum_{ab(a \neq b)} \hat{V}_{ab}. \quad (13.85)$$

Применим вариационный подход, взяв в качестве пробной многочастичной функции слэтеровский детерминант, построенный из ортонормированных

орбиталей  $\psi_\lambda$ ,  $\lambda = 1, \dots, N$ . Наша цель — найти наилучший набор орбиталей, минимизирующий полную энергию системы. Повторяя рассуждения разд. 12.4, мы можем вычислить среднее значение гамильтониана (13.85). Оно включает сумму одночастичных вкладов и энергию взаимодействия, как прямые, так и обменные члены для каждой пары частиц,

$$E = \sum_{\lambda; (\text{occ})} (\lambda | \hat{h} | \lambda) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'; (\text{occ}, \lambda \neq \lambda')} \left( (\lambda\lambda' | \hat{V} | \lambda'\lambda) - (\lambda\lambda' | \hat{V} | \lambda\lambda') \right), \quad (13.86)$$

где сумма берётся по занятым орбиталям от 1 до  $N$ . В явном виде

$$(\lambda | \hat{h} | \lambda') = \int d\tau_1 \psi_\lambda^*(1) (\hat{K}_1 + \hat{U}_1) \psi_{\lambda'}(1) \quad (13.87)$$

и

$$(\lambda_1\lambda_2 | \hat{V} | \lambda_3\lambda_4) = \int d\tau_1 d\tau_2 \psi_{\lambda_1}^*(1) \psi_{\lambda_2}^*(2) \hat{V}(1, 2) \psi_{\lambda_3}(2) \psi_{\lambda_4}(1), \quad (13.88)$$

где аргументы (1), (2)... означают весь набор одночастичных переменных, включая спиновые, а их элемент объёма обозначен  $d\tau$ .

Чтобы найти функции  $\psi_\lambda$ , мы варьируем энергию (13.86), рассматривая  $\psi_\lambda$  и  $\psi_\lambda^*$  как независимые переменные. Варьирование матричных элементов по  $\psi_\lambda^*$  даёт

$$\delta(\mu | \hat{h} | \mu') = \delta_{\mu\lambda} \int d\tau_1 \delta\psi_\lambda^*(1) \hat{h}(1) \psi_{\mu'}(1); \quad (13.89)$$

$$\begin{aligned} & \delta(\mu\mu' | \hat{V} | \nu'\nu) = \\ & = \int d\tau_1 d\tau_2 \left( \delta_{\mu\lambda} \delta\psi_\lambda^*(1) \psi_{\mu'}^*(2) + \delta_{\mu'\lambda} \psi_\mu^*(1) \delta\psi_\lambda^*(2) \right) \hat{V}(1, 2) \psi_{\nu'}(2) \psi_\nu(1). \end{aligned} \quad (13.90)$$

Мы вводим оператор эффективного поля  $\hat{W}$ , действующий на переменную 1 через матричный элемент взаимодействия с другими частицами:

$$W_{\mu\nu}(1) = \int d\tau_2 \psi_\mu^*(2) \hat{V}(1, 2) \psi_\nu(2). \quad (13.91)$$

Изменяя обозначения во втором члене в (13.90), мы можем переписать его как

$$\delta(\mu\mu' | \hat{V} | \nu'\nu) = \int d\tau_1 \delta\psi_\lambda^*(1) [\delta_{\lambda\mu} W_{\mu'\nu'}(1) \psi_\nu(1) + \delta_{\lambda\mu'} W_{\mu\nu}(1) \psi_{\nu'}(1)]. \quad (13.92)$$

Из-за суммы по занятым состояниям в (13.86) два члена в (13.92) дают равные вклады и сокращают множитель  $1/2$ ; таким же образом мы можем рассмотреть обменные члены.

Осложняющим обстоятельством является то, что результирующее самосогласованное поле различно для разных одночастичных состояний, и поэтому функции  $\psi_\lambda$  не являются автоматически ортогональными. Мы можем искать минимум энергии при дополнительном условии ортогональности:

$$(\lambda|\lambda') \equiv \int d\tau \psi_\lambda^* \psi_{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (13.93)$$

Это можно сделать с помощью  $N(N+1)/2$  множителей Лагранжа  $\varepsilon_{\lambda\lambda'} = \varepsilon_{\lambda'\lambda}$ . Таким образом, мы решаем вариационную задачу

$$\delta \left( E - \sum_{\lambda\lambda'} \varepsilon_{\lambda\lambda'} (\lambda|\lambda') \right) = 0. \quad (13.94)$$

Параметры  $\varepsilon_{\lambda\lambda'}$  должны определяться в конце из  $N(N+1)/2$  условий ортогональности (13.93).

Собирая все члены в выражении для вариации энергии (13.86), мы получаем

$$\int d\tau_1 \delta\psi_\lambda^*(1) \left\{ \hat{h}(1)\psi_\lambda(1) + \sum_{\lambda'} [W_{\lambda'\lambda'}(1)\psi_\lambda(1) - W_{\lambda'\lambda}(1)\psi_{\lambda'}(1) - \varepsilon_{\lambda\lambda'}\psi_{\lambda'}(1)] \right\} = 0. \quad (13.95)$$

Для произвольных вариаций  $\delta\psi_\lambda(1)$  уравнение (13.95) приводит к *уравнениям Хартри–Фока*,

$$\hat{h}(1)\psi_\lambda(1) + \sum_{\lambda'} [W_{\lambda'\lambda'}(1)\psi_\lambda(1) - W_{\lambda'\lambda}(1)\psi_{\lambda'}(1) - \varepsilon_{\lambda\lambda'}\psi_{\lambda'}(1)] = 0. \quad (13.96)$$

Это нелинейные зацепляющиеся уравнения для функций  $\psi_\lambda$ .

Если пренебречь обменными членами и неортогональностью  $\psi_\lambda$ , опуская в (13.96) недиагональные члены,  $W_{\lambda'\lambda}$  и  $\varepsilon_{\lambda\lambda'}$  с  $\lambda' \neq \lambda$ , мы получим

$$\left( \hat{K}_1 + \tilde{U}_1 \right) \psi_\lambda(1) = \varepsilon_\lambda \psi_\lambda(1), \quad (13.97)$$

то есть шрёдингеровскую задачу на собственные значения для энергий  $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_{\lambda\lambda}$  и эффективного поля

$$\tilde{U}_\lambda(1) = \sum_{\lambda'(\neq\lambda)} W_{\lambda'\lambda'}(1) + \hat{U}(1). \quad (13.98)$$

Из определения  $W$  (13.91) мы видим, что поле (13.98) — это среднее значение энергии прямого взаимодействия частицы на орбитали  $\lambda$  с внешним полем и всеми остальными частицами. Таким образом, уравнение (13.98) сводится к уравнению Хартри (13.54).

В некоторых задачах молекулярной и ядерной физики удобно работать с неортогональными одночастичными орбиталями. Например, электронные функции, локализованные около различных ядер в молекуле, не ортогональны, вспомните молекулярный ион водорода (разд. I.19.6). Некоторые ядра могут иметь кластерную структуру, будучи построены из  $\alpha$ -кластеров (ядер  ${}^4\text{He}$ ); нуклонные волновые функции в разных кластерах не ортогональны. Обобщение на такие случаи очевидно, вспомните задачу 9.3.

### 13.8. Пространственно однородные системы

Как правило, уравнения Хартри—Фока можно решить только численно, итерациями. Во многих случаях (атомы, молекулы, кристаллы) такие вычисления дают результаты в разумном согласии с экспериментом. *Дальнедействующий* характер кулоновского взаимодействия благоприятен для приближения среднего поля, поскольку отталкивание уменьшает важность близких встреч нескольких частиц; такие корреляции недоступны для картины среднего поля. В отличие от этого, в ядрах прямое применение приближения Хартри—Фока работает плохо, главным образом из-за сильного *короткодействующего* отталкивания. Сначала нужно решить двухчастичную задачу в присутствии других частиц. Решение может значительно отличаться от двухчастичного рассеяния в вакууме из-за принципа Паули, который делает многие конечные и промежуточные состояния недоступными. После этого можно построить *эффективное* сглаженное взаимодействие, которое служило бы исходным для конструирования самосогласованного поля. Конечно, необходимо иметь в виду, что метод Хартри—Фока никогда не даёт точного решения многочастичной задачи. В лучшем случае это просто хорошее нулевое приближение. Следующий шаг должен учесть *корреляции* между частицами, которые не описываются их средним незави-

симым движением, нечувствительным к флуктуациям, вызванным малым числом частиц.

Уравнения Хартри—Фока можно точно решить для *пространственно однородной* системы (в большом объёме  $V$ ). Такая система без взаимодействия есть идеальный Ферми-газ. Предположим, что внешнее поле создаётся только стенками контейнера, а взаимодействие зависит только от относительного расстояния между частицами,  $U(1, 2) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ . Проекция спина каждой частицы  $\sigma$  сохраняется, и матричный элемент  $W_{\mu\nu}$  (13.91) диагонален по спиновым переменным. Тогда член прямого взаимодействия в (13.96) содержит сумму по частицам  $\lambda'$  с обеими проекциями спина  $\sigma = \pm 1/2$ , тогда как в обменном члене сумма берётся по частицам  $\lambda'$  с той же проекцией спина  $\sigma$ , что и у частицы  $\lambda$ .

### Задача 13.7

Покажите, что в только что описанном случае плоские волны (13.3) дают точные орбитали Хартри—Фока, и найдите их энергии.

### Решение.

Плоские волны с разными  $(\lambda) = (\mathbf{p}, \sigma)$  ортогональны, и мы можем положить  $\varepsilon_{\lambda\lambda'} = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}$ ; величины  $\varepsilon_\lambda$  являются хартри—фоковскими одночастичными энергиями (собственными значениями). Уравнения Хартри—Фока имеют вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_\lambda(\mathbf{r}, s_z) + \sum_{\lambda'} \left( W_{\lambda'\lambda'}(\mathbf{r}) \psi_\lambda(\mathbf{r}, s_z) - W_{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}) \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}, s_z) \right) = \varepsilon_\lambda \psi_\lambda(\mathbf{r}, s_z). \quad (13.99)$$

Здесь сумма берётся по занятым состояниям. Предполагая, что хартри—фоковский базис даётся плоскими волнами (13.3), и используя числа заполнения  $n_{\mathbf{p}\sigma}$ , равные 0 вне  $\Sigma_F$  и 1 внутри  $\Sigma_F$ , мы вычисляем матричные элементы среднего поля. Для прямых вкладов мы получаем

$$\begin{aligned} M^{(\text{dir})}(\mathbf{r}) &= \sum_{\lambda'} W_{\lambda'\lambda'}(\mathbf{r}) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} n_{\mathbf{p}'\sigma'} \int d^3 r' \sum_{s'_z} \psi_{\mathbf{p}'\sigma'}^*(\mathbf{r}', s'_z) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}'\sigma'}(\mathbf{r}', s'_z), \end{aligned} \quad (13.100)$$

что даёт, с функциями  $\psi$  в виде плоских волн,

$$M^{(\text{dir})}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} n_{\mathbf{p}'\sigma'} \int d^3 r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = nU_0. \quad (13.101)$$

Здесь мы используем Фурье-компоненты взаимодействия,

$$U_{\mathbf{Q}} \equiv \int d^3r e^{-(i/\hbar)(\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r})} U(\mathbf{r}), \quad (13.102)$$

и полную плотность

$$n = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (13.103)$$

Таким образом, прямой член сводится к константе, где нулевая Фурье-компонента  $U_0$  равна интегралу по объёму от взаимодействия со всеми остальными частицами. В обменном члене мы имеем только одну проекцию спина

$$W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{r}) \Rightarrow \frac{1}{V} \int d^3r' e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (13.104)$$

Переходя к интегрированию по относительной координате  $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ , мы получаем в обменном члене

$$\sum_{\lambda'} W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{r}) \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}, s_z) \Rightarrow \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'\sigma} n_{\mathbf{p}'\sigma} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}. \quad (13.105)$$

Мы видим, что плоская волна  $\exp[(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})]$  воспроизводится во всех членах, и поэтому она даёт решение уравнений Хартри—Фока. Этот результат очевиден, потому что в однородной системе импульс частицы сохраняется. Коэффициент при этой экспоненте определяет новую энергию частицы:

$$\varepsilon_{\lambda} \Rightarrow \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + nU_0 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}'\sigma} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}. \quad (13.106)$$

Член  $nU_0$  соответствует (рис. 13.4, а) виртуальному рассеянию вперёд частицы  $(\mathbf{p}, \sigma)$  сферой Ферми полной плотности  $n$ , когда передача импульса  $\mathbf{Q} = 0$ . Последний член в (13.106) описывает виртуальный обменный процесс (рис. 13.4, б), когда частица  $(\mathbf{p}, \sigma)$  передаёт импульс  $\mathbf{p}-\mathbf{p}'$  фоновой частице с квантовыми числами  $\mathbf{p}'$  и  $\sigma' = \sigma$  и обменивается ролями с этой частицей.

Поскольку одночастичные волновые функции не меняются по сравнению с невзаимодействующим Ферми-газом и поправка к энергии линейна по взаимодействию, в этом конкретном случае приближение Хартри—Фока на самом деле эквивалентно первому порядку теории возмущений. Для конечной системы (атом, ядро или атомы в ловушке) приближение Хартри—

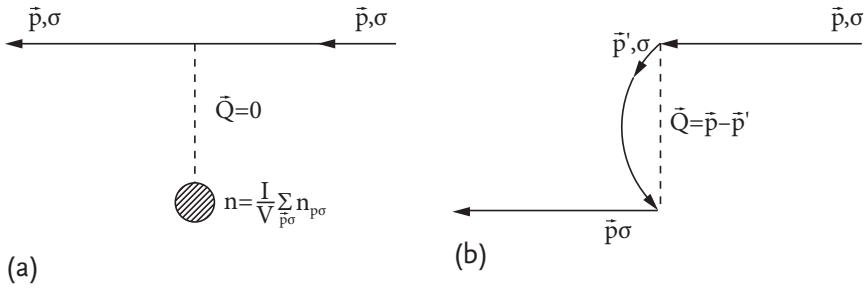


Рис. 13.4. Две диаграммы для приближения Хартри–Фока: а — прямая, б — обменная в однородной Ферми-системе

Фока выходит за пределы теории возмущений и определяет равновесную форму среднего поля.

### 13.9. Кулоновский газ

Для электронного газа в металлах или плазме метод Хартри–Фока может применяться с соответствующими изменениями. Из-за дальнегодействующего кулоновского отталкивания такой газ нестабилен. Равновесие достигается благодаря присутствию нейтрализующего положительного заряда. В металлах это обеспечивается ионами решётки. Если мы пренебрежём эффектами кристаллической структуры, мы можем использовать то же *приближение желе*, что и в разд. 13.6, беря вместо реальной дискретной решётки однородный компенсирующий фон положительного заряда.

Рассеяние электрона фоном точно компенсирует член Хартри  $nU_0$  в уравнении (13.106). С Фурье-компонентой (II.12.17) кулоновского электрон-электронного взаимодействия

$$U_{\mathbf{Q}} = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{Q^2} \tag{13.107}$$

и исключая нулевую Фурье-компоненту, компенсируемую ионами, мы получаем *закон дисперсии* электронов в приближении однородной среды:

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}} n_{\mathbf{p}'\sigma} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}} n_{\mathbf{p}'\sigma} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}. \tag{13.108}$$

#### Задача 13.8

Вычислите энергию электрона  $\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}$  и полную обменную энергию

$$E^{\text{exch}} = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'(\mathbf{p}' \neq \mathbf{p})} n_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}'\sigma} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}. \quad (13.109)$$

### Решение.

Интегрируя в (13.108) и (13.109) по импульсам от  $p = 0$  до  $p_F$ , мы получаем

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2 p_F}{\pi \hbar} \left( 1 + \frac{p_F^2 - p^2}{2pp_F} \ln \left| \frac{p + p_F}{p - p_F} \right| \right), \quad (13.110)$$

$$E^{\text{exch}} = -N \frac{3e^2 p_F}{4\pi \hbar}. \quad (13.111)$$

Заметим, что энергия электрона (13.108) может быть найдена как изменение полной энергии взаимодействия (13.109) при добавлении одного электрона с квантовыми числами  $(\mathbf{p}, \sigma)$ :

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\delta E^{\text{exch}}}{\delta n_{\mathbf{p}\sigma}}. \quad (13.112)$$

В соответствии с простыми аргументами разд. 13.1, кулоновская энергия Ферми-газа (в приближении Хартри—Фока — обменная энергия) меньше, чем кинетическая энергия (13.9) в газе высокой плотности:

$$\frac{E_0}{E^{\text{exch}}} \sim \frac{\varepsilon_F}{(e^2 p_F / \hbar)} \sim \frac{p_F \hbar}{m e^2} \sim \frac{\hbar^2}{r_0 m e^2} \sim \frac{a}{r_0}. \quad (13.113)$$

Ферми-газ с кулоновским взаимодействием приближается к идеальному Ферми-газу,  $E_0 > E^{\text{exch}}$ , при большой плотности, когда среднее расстояние между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3} \sim \hbar/p_F$  становится малым по сравнению с характерной кулоновской длиной, боровским радиусом  $a$ . Часто это выражают через обратный параметр  $r_s = r_0/a$ , который мал в случае высокой плотности — почти идеального Ферми-газа. В противоположном случае малой плотности,  $r_s > 1$ , квантовые статистические эффекты слабее, чем кулоновское взаимодействие, и система приближается к упорядоченному

состоянию *Вигнеровского кристалла*, управляемому классическим электростатическим отталкиванием.

### Задача 13.9

Найдите парамагнитную спиновую восприимчивость электронного газа в приближении Хартри—Фока.

#### Решение.

Уравнение (13.42) всё ещё применимо, но плотность состояний на поверхности Ферми стала другой из-за изменившегося закона дисперсии (13.110). На  $\Sigma_F$ ,

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} - \frac{e^2 p_F}{\pi \hbar} \equiv \varepsilon_F^\circ - \frac{e^2 p_F}{\pi \hbar}. \quad (13.114)$$

Отсюда плотность состояний на единичный объём (13.10)

$$\nu_F = \frac{2p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi dp_F}{d\varepsilon_F} = \frac{\nu_0}{1 - (me^2/p_F\pi\hbar)}, \quad (13.115)$$

где  $\nu_0$  — плотность состояний на  $\Sigma_F$  для невзаимодействующего Ферми-газа (13.12). Сравнивая с выражением (13.111) для обменной энергии, мы получаем

$$\nu_F = \frac{\nu_0}{1 + (2/3)E^{\text{exch}}/(N\varepsilon_F^\circ)}. \quad (13.116)$$

Поэтому спиновая парамагнитная восприимчивость даётся выражением

$$\chi_s = \frac{\chi_s^\circ}{1 + (2/3)E^{\text{exch}}/(N\varepsilon_F^\circ)}. \quad (13.117)$$

Из-за отрицательной обменной энергии (13.111) энергетически выгодно выстроить электронные спины в одном направлении. Действительно, обменная энергия — это просто следствие корреляции электронов с параллельными спинами (вспомните также правила Хунда, разд. 12.7). Поскольку внутренняя корреляция помогает ориентировать спины, мы получаем  $\chi_s > \chi_s^\circ$ . С ростом отношения  $E^{\text{exch}}/(N\varepsilon_F)$  при уменьшении плотности  $\propto p_f^{-1} \propto n^{-1/3}$ , в некоторой точке выигрыш в обменной энергии может стать больше проигрыша в кинетической энергии, и будет выгодно выстроить все спины в одном направлении. Это был бы фазовый переход в *ферромагнитное* состояние. На самом деле этому мешают корреляции между электронами с антипараллельными спинами. Приближение Хартри—Фока пренебрегает такими корреляциями.

К сожалению, приближение Хартри—Фока для электронного газа не вполне удовлетворительно из-за неаналитического результата с сингулярностью спектра (13.112) на поверхности Ферми. Поэтому высшие поправки к энергии основного состояния не могут быть вычислены в теории возмущений.

### 13.10. Теория функционала плотности

Подходы Томаса—Ферми или Хартри—Фока имеют целью построить волновую функцию основного состояния многочастичной системы вариационным методом. На самом деле для макроскопически большого числа частиц такая волновая функция бесполезна. Физические эксперименты обычно имеют дело с макроскопическими наблюдаемыми или с элементарными возбуждениями, т. е. с малыми отклонениями от основного состояния. Первая часть этой задачи решается подходом *функционала плотности* (В. Кон, Л. Шэм [72]), который выбирает локальную плотность  $n(\mathbf{r})$  в качестве основной переменной, характеризующей основное состояние [73].

Как следует из задачи I.10.2, плотность основного состояния  $n(\mathbf{r})$  однозначно определяет потенциал  $U(\mathbf{r})$ , действующий на плотность. Взяв

$$\hat{h} = \int d^3r U(\mathbf{r})\hat{n}(\mathbf{r}), \quad (13.118)$$

мы можем буквально повторить доказательство из этой задачи с

$$\langle \hat{F} \rangle \Rightarrow n(\mathbf{r}) \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle. \quad (13.119)$$

Для данного внешнего потенциала  $U(\mathbf{r})$  истинная плотность основного состояния  $n(\mathbf{r})$  минимизирует энергию основного состояния, которую можно рассматривать как функционал от плотности  $E[n(\mathbf{r})]$ . Минимизация должна производиться с дополнительным ограничением для полного числа частиц

$$\int d^3r n(\mathbf{r}) = N. \quad (13.120)$$

Теория утверждает существование функционала энергии, но не определяет его точную форму. Однако всегда можно ввести фиктивные *квазичастицы Кона—Шэма*, занимающие такие одночастичные состояния  $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ ,

$\lambda = 1, \dots, N$ , что они дают полную плотность

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=1}^N |\varphi_{\lambda}(\mathbf{r})|^2. \quad (13.121)$$

Тогда минимизация функционала от плотности может быть выражена в терминах одночастичного уравнения для функций  $\varphi_{\lambda}$ , которое самосогласованно зависит от полной плотности. Вывод производится аналогично приближению Хартри (разд. 13.4) и требует введения лагранжевых множителей  $\varepsilon_{\lambda}$  для нормировки волновых функций квазичастиц  $\int d^3r |\varphi_{\lambda}(\mathbf{r})|^2 = 1$ .

На практике, как это обычно делается, мы предполагаем, что полная энергия состоит из классической кинетической энергии  $K[n(\mathbf{r})]$ , внешней потенциальной энергии  $E_{\text{ext}}[n(\mathbf{r})]$ , энергии взаимодействия типа Хартри, даваемой классическим выражением, соответствующим прямому взаимодействию,

$$E_{\text{int}}[n(\mathbf{r})] = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}'), \quad (13.122)$$

и остаточной квантовой поправкой к энергии взаимодействия и кинетической энергии, которую обычно называют *обменно-корреляционной энергией*  $E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$ :

$$E[n(\mathbf{r})] = K + E_{\text{ext}} + E_{\text{int}} + E_{\text{xc}}. \quad (13.123)$$

Вариация членов взаимодействия даёт соответствующие потенциалы:

$$U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\text{ext}}}{\delta n(\mathbf{r})}, \quad (13.124)$$

$$\frac{\delta E_{\text{int}}}{\delta n(\mathbf{r})} = \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}'), \quad (13.125)$$

$$U_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] = \frac{\delta E_{\text{xc}}}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (13.126)$$

Вариационная процедура, подобная той, что использовалась в приближении Хартри (13.54), даст *уравнения Кона—Шэма* для набора функций  $\varphi_{\lambda}$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U[n(\mathbf{r})] \right\} \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\lambda} \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) \quad (13.127)$$

с полным эффективным потенциалом

$$U[n(\mathbf{r})] = U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')n(\mathbf{r}') + U_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]. \quad (13.128)$$

Как и в приближении Хартри или Хартри—Фока, эти уравнения нужно решать самосогласованно, начиная с пробной плотности  $n_0(\mathbf{r})$ , находя эффективный потенциал и функции  $\varphi_\lambda$ , определяя следующую итерацию  $n_1(\mathbf{r})$  и продолжая до сходимости; если используется хорошее приближение для  $U_{\text{xc}}$ , то получившаяся плотность будет близка к истинной функции  $n(\mathbf{r})$ . Таким образом, как это ни удивительно, точная плотность и энергия основного состояния (13.123) могут быть вычислены в терминах фиктивных орбиталей невзаимодействующих квазичастиц в поле (13.128).

Не существует точной теории, которая могла бы определить обменно-корреляционный член (13.126). Это нужно делать приближённо для каждой конкретной системы. Для металлов можно использовать *приближение локальной плотности* (LDA), в котором предполагается, что локальные свойства реальной системы близки к свойствам *однородного* электронного газа той же плотности. последние можно определить теоретически, см., например, (13.111) для обменных эффектов. Можно улучшить это приближение, учитывая градиенты плотности. Подобный подход используется в ядерной физике с так называемой *параметризацией Скурма*. Эту теорию можно обобщить на случай бозонов, магнитных эффектов и эффектов, зависящих от спина, многокомпонентных и сверхпроводящих (сверхтекучих) систем. Она также даёт полезный подход к тем возбуждённым состояниям, которые могут рассматриваться как флуктуации плотности.

**Дополнительная литература:** [68], [73], [74], [75], [76], [77]

При определенных заданных условиях, и только при этих условиях, у собрания людей появляются новые черты, которые сильно отличаются от характеристик отдельных людей, составляющих это собрание. Чувства и мысли всех собравшихся принимают одно направление, сознательная личность исчезает. Формируется коллективный разум... Таким образом у собрания появляются черты того, что в отсутствии более подходящего выражения я буду называть организованной толпой...

*Г. Лебон. «Толпа»*

## Глава 14

### Коллективные возбуждения

#### 14.1. Линейная цепочка

В предыдущей главе мы обсуждали многофермионные системы без взаимодействия или в приближении, когда взаимодействие сводится к среднему полю. Теперь мы переходим к ситуации, когда взаимодействие создаёт новые типы коллективного поведения, которые отсутствовали в случае невзаимодействующих частиц.

Простой начальный пример — линейная цепочка  $N$  атомов, связанных упругими силами. Это упрощённая одномерная модель кристалла, где силы имеют электростатическое происхождение, происходя от прямых взаимодействий между ионами и взаимодействий через электронные облака. Как обсуждалось ранее (разд. 13.5), электроны адиабатически подстраивают своё движение под медленно меняющиеся положения ионов. Можно начать с классической картины и квантовать её подобно квантованию электромагнитного поля. Однако мы можем прямо написать квантовый гамильтониан, который зависит от координат ионов  $\hat{x}_j$  и сопряжённых импульсов  $\hat{p}_j$ .

Этот гамильтониан содержит кинетическую энергию

$$\hat{K} = \sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2M}, \quad (14.1)$$

где для простоты мы взяли все массы  $M$  одинаковыми, и энергию взаимодействия, которая зависит от расстояний между ионами:

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{jj'} U(x_j - x_{j'}). \quad (14.2)$$

Мы предполагаем, что а) минимум потенциальной энергии даётся периодической решёткой,  $x_j = X_j = ja$ , с периодом  $a$ , и б) решётка *стабильна*, так что типичный размер волновой функции каждого иона (амплитуда нулевых колебаний) мал по сравнению с  $a$ . Тогда удобными координатами являются отклонения атомов от своих равновесных положений,  $\hat{u}_j = \hat{x}_j - X_j$ , и при  $|u_j| \ll a$  мы можем разложить потенциальную энергию по степеням  $\hat{u}_j$ .

В минимуме  $U$  силы обращаются в ноль, и разложение начинается с *квадратичных* членов

$$\hat{U} = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{jj'} C_{jj'} \hat{u}_j \hat{u}_{j'} + \dots, \quad (14.3)$$

где мы не выписали явно кубические члены, члены четвёртой степени и т. д. Сила, действующая на атом  $j$ , в линейном приближении есть

$$\hat{F}_j = - \frac{\partial \hat{U}}{\partial u_j} = - \sum_{j'} C_{jj'} \hat{u}_{j'}. \quad (14.4)$$

Коэффициенты возвращающей силы  $C_{jj'}$  зависят только от расстояния между атомами,  $C_{jj'} = C(j - j')$ . Очевидно также, что полная потенциальная энергия не может измениться при сдвиге всей цепочки как целого,  $\hat{u}_j \rightarrow \hat{u}_j + \text{const}$ . Поэтому должно выполняться тождество

$$\sum_{j'} C(j - j') = 0. \quad (14.5)$$

Нам нужно зафиксировать граничные условия на концах цепочки. Для длинной цепочки точная форма этих условий не очень существенна, и, как мы делали раньше, мы поместим цепочку на кольцо, используя периодические граничные условия:

$$\hat{u}_j = \hat{u}_{j+N}. \quad (14.6)$$

Операторные уравнения движения имеют тот же вид, что и классические уравнения

$$\dot{u}_j = \frac{\hat{P}_j}{M}, \quad \dot{p}_j = \hat{F}_j. \quad (14.7)$$

Используя (14.4), мы приходим к системе связанных операторных уравнений

$$M\ddot{u}_j + \sum_{j'} C(j - j')\hat{u}_{j'}(t) = 0. \quad (14.8)$$

Как мы знаем из разд. I.8.6, трансляционная симметрия решётки приводит к тому, что стационарные состояния могут характеризоваться *квазиимпульсом*  $k$ . В соответствии с этим мы ищем *нормальные моды* решётки в виде

$$\hat{u}_j(k, t) = \hat{b}_k(t)e^{ikX_j} = \hat{b}_k(t)e^{ikaj}. \quad (14.9)$$

Квазиимпульс  $k$  квантуется, поскольку условие (14.6) даёт ( $L = Na$  — полная длина цепочки)

$$e^{ikaN} = 1 \quad \rightsquigarrow \quad k = \frac{2\pi}{L} \times (\text{integer}). \quad (14.10)$$

Чтобы перечислить все различные решения, достаточно ограничиться значениями в одной элементарной ячейке обратной решётки (разд. I.8.7)

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (14.11)$$

Значения  $k$  вне этой ячейки могут быть сведены к первой зоне Бриллюэна (14.11) прибавлением вектора обратной решётки  $K = 2\pi n/a$ , где  $n$  — целое число, что возвращает к тем же нормальным модам (14.9). С учётом квантования (14.10, 14.11) мы получаем  $N$  нормальных мод вместо исходных  $N$  независимых движений отдельных атомов. Таким образом мы находим *коллективные возбуждения* взаимодействующей системы, хотя число степеней свободы не изменилось.

Операторные амплитуды  $b_k(t)$  *диагонализуют* систему (14.8), приводя к отдельным уравнениям для каждой моды. Используя тот факт, что силовые константы  $C$  зависят только от расстояний, мы получаем

$$\sum_{j'} C(j - j')e^{ikaj'} = e^{ikaj} \sum_{j'} C(j - j')e^{-ika(j-j')} = e^{ikaj} C_k, \quad (14.12)$$

где Фурье-компонента силы равна

$$C_k = \sum_n C(n) e^{-ikan}. \quad (14.13)$$

С учётом  $C(n) = C(|n|)$  и симметрии положительных и отрицательных значений  $k$  в (14.11) Фурье-компоненты действительны, и мы можем записать уравнение (14.13) как

$$C_k = \sum_n \cos(kan) C(|n|) = C_{-k}. \quad (14.14)$$

Нормальная мода  $k$  удовлетворяет уравнению гармонических колебаний

$$\ddot{b}_k + \omega_k^2 \hat{b}_k(t) = 0 \quad (14.15)$$

с частотой

$$\omega_k = \sqrt{\frac{C_k}{M}} = \omega(-k). \quad (14.16)$$

Операторные амплитуды  $\hat{b}_k(t)$  имеют гармоническую зависимость от времени  $\sim \exp[-i\omega(k)t]$ , и система стабильна, если все Фурье-компоненты  $C_k \geq 0$ , и потому  $\omega(k)$  действительны. Мы можем рассматривать  $\omega(k) \geq 0$ , поскольку полный оператор отклонения эрмитов и должен включать оба члена  $\propto \exp[\pm i\omega(k)t]$ .

Трансляционная инвариантность взаимодействия (14.5) показывает, что

$$C_0 = \sum_n C(|n|) = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \omega_{k=0} = 0. \quad (14.17)$$

Для длинной цепочки квазиимпульс  $k$  — почти непрерывная переменная, и мы можем рассматривать непрерывный спектр  $\omega(k)$ . В соответствии с (14.16) при малых  $k$  мы должны иметь

$$\omega^2(k) \approx \omega^2(0) + \frac{1}{2} \left( \frac{d^2\omega^2}{dk^2} \right)_{k=0} k^2 + \dots \quad (14.18)$$

Поэтому при малых  $k$  (длина волны много больше периода решётки  $a$ ) спектр — *линейная* функция волнового вектора

$$\omega(k) \approx vk, \quad (14.19)$$

и, интерпретируя волны, бегущие по решётке, как *звуковые* волны, мы получаем *скорость звука*

$$v = \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k=0}. \quad (14.20)$$

Таким образом, коллективное движение с большими длинами волн похоже на волны плотности в сплошной среде, где дискретность атомной структуры не существенна.

### Задача 14.1

Найдите спектр нормальных мод и скорость звука для цепочки со взаимодействиями только между ближайшими соседями.

#### Решение.

Как следует из (14.5), в этом случае ненулевые силовые константы — это  $C(1) = C(-1) = -(1/2)C(0)$ , причём должно быть  $C(0) > 0$ . Спектр (рис. 14.1, а) описывается формулой

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2C(0)}{M}} \left| \sin \left( \frac{ka}{2} \right) \right|, \quad (14.21)$$

а скорость звука равна

$$v = \sqrt{\frac{C(0)a^2}{2M}}. \quad (14.22)$$

Нулевая частота волн в *пределе больших длин волн* — это глубокое следствие *спонтанно нарушенной симметрии*. Трансляционная симметрия была нарушена выбором положения цепочки, хотя все другие положения были бы эквивалентны, имея ту же энергию. Симметрия восстанавливается существованием бесконечно многих вырожденных основных состояний, отличающихся друг от друга только глобальными сдвигами. Но звуковая волна в пределе  $k \rightarrow 0$  есть просто общий сдвиг всех атомов, поскольку фаза колебаний всех атомов одинакова. Этот предел коллективного возбуждения эквивалентен свободной трансляции в другое вырожденное основное состояние, что не требует добавочной энергии, поэтому  $\omega_{k \rightarrow 0} \rightarrow 0$ . Эти аргументы представляют простой пример общей *теоремы Голдстоуна*, которая утверждает присутствие ветви в спектре возбуждений, имеющей нулевую энергию в длинноволновом пределе и восстанавливающей нарушенную симметрию (*Голдстоуновская мода*). Строго говоря, это утверждение справедливо только в пределе большой системы, когда можно игнорировать дискретность волновых векторов и говорить о непрерывном спектре возбуждений.

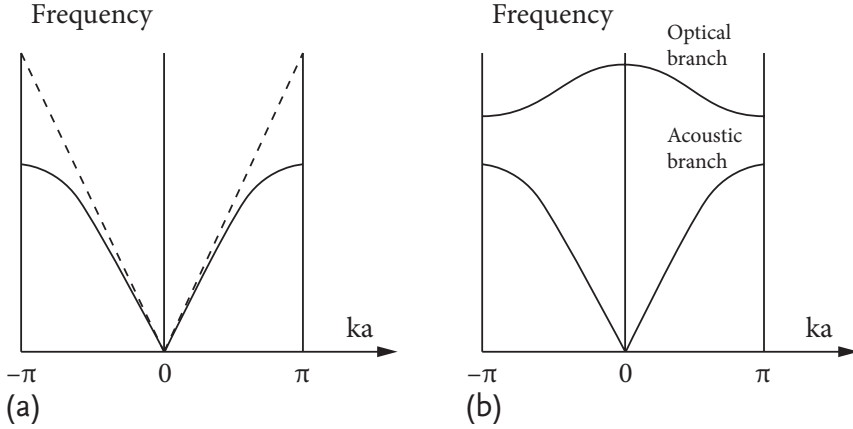


Рис. 14.1. Спектры одномерной цепочки атомов: а — частотный спектр (14.21) одномерной цепочки со взаимодействием ближайших соседей; максимальная частота при  $|ka| = \pi$  равна  $\sqrt{\frac{C(0)}{2M}}$ , пунктирные линии — линейная экстраполяция спектра; б — акустическая и оптическая ветви для двух атомов в элементарной ячейке (задача 14.3)

## 14.2. Фононы

Общее решение динамической задачи для периодической цепочки даётся произвольной эрмитовой суперпозицией нормальных мод

$$\hat{u}_j(t) = \sum_k \left\{ \hat{b}_k e^{ika_j - i\omega(k)t} + \hat{b}_k^\dagger e^{-ika_j + i\omega_k t} \right\}. \quad (14.23)$$

Мы можем найти коммутационные свойства операторных амплитуд  $\hat{b}_k$  и  $\hat{b}_k^\dagger$ , вернувшись к исходным операторам координат и импульсов отдельных атомов, которые удовлетворяют при равных временах соотношению

$$[\hat{p}_j, \hat{u}_{j'}] = -i\hbar\delta_{jj'}. \quad (14.24)$$

В терминах нормальных мод (14.23) импульс атома выражается как

$$\hat{p}_j = M\dot{u}_j = -iM \sum_k \omega(k) \left\{ \hat{b}_k e^{ika_j - i\omega(k)t} - \hat{b}_k^\dagger e^{-ika_j + i\omega_k t} \right\}. \quad (14.25)$$

Коммутатор (14.24) не должен зависеть от времени. Это возможно только если

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] = Z_k \delta_{kk'} \quad (14.26)$$

с некоторой действительной амплитудой  $Z_k$ . Тогда мы получаем

$$[\hat{p}_j, \hat{u}_{j'}] = -iM \sum_k \omega_k \left( Z_k e^{ika(j-j')} + Z_k^* e^{-ika(j-j')} \right). \quad (14.27)$$

Множитель  $\delta_{jj'}$ , который требуется в (14.24), появляется, если  $\omega_k Z_k$  не зависит от  $k$ , потому что сумма по всем модам даёт

$$\sum_k e^{ika(j-j')} = N \delta_{jj'}. \quad (14.28)$$

Поэтому  $Z_k = \hbar/2MN\omega_k$ . Вводя по аналогии с квантованием электромагнитного поля новые операторы

$$\hat{b}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \hat{a}_k, \quad \hat{b}_k^\dagger = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \hat{a}_k^\dagger, \quad (14.29)$$

мы получаем алгебру осцилляторных операторов рождения и уничтожения,

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}. \quad (14.30)$$

Эта интерпретация подтверждается тем, что временная зависимость этих операторов,  $\exp(-i\omega t)$  для оператора уничтожения и  $\exp(i\omega t)$  для оператора рождения (с положительным  $\omega$ ), соответствует смыслу этих операторов (разд. II.13.3 и I.11.8).

Окончательное выражение для атомных переменных через нормальные моды колебаний решётки имеет вид

$$\hat{u}_j(t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \left\{ \hat{a}_k e^{ika_j - i\omega(k)t} + \hat{a}_k^\dagger e^{-ika_j + i\omega_k t} \right\}. \quad (14.31)$$

Производя ту же реинтерпретацию в терминах частиц, что и в случае фотонов (разд. II.13.3), мы приходим к картине *фононов*, квантов колебательного движения многочастичной системы. В этом одномерном примере фононы характеризуются своим волновым вектором (квазиимпульсом в первой зоне Бриллюэна) и соответствующей частотой  $\omega(k)$  или энергией  $\hbar\omega(k)$ . У нас есть явные выражения для физических величин через операторы рождения

и уничтожения фононов, которые удовлетворяют статистике Бозе (14.30) вне зависимости от статистики исходных ионов.

### Задача 14.2

Покажите, что те же правила квантования следуют из условия, что исходный гамильтониан (14.1,14.2) имеет вид

$$\hat{H} = U_0 + \sum_k \hbar\omega(k) \left( \hat{N}_k + \frac{1}{2} \right), \quad (14.32)$$

где операторы фононных чисел заполнения с целыми собственными значениями равны

$$\hat{N}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (14.33)$$

### 14.3. Фононные моды

В общем случае трёхмерной решётки с несколькими атомами в элементарной ячейке можно обобщить результаты, полученные для линейной цепочки. Но имеет смысл подчеркнуть несколько новых особенностей.

#### Задача 14.3

Найдите фононный спектр линейной цепочки с чередующимися атомами  $a$  и  $b$ .

#### Решение.

Гамильтониан цепочки с элементарной ячейкой из двух атомов даётся выражением ( $C^{ab} = C_{ba}$ )

$$\hat{H} = \sum_{ja} \frac{(\hat{p}_j^a)^2}{2M_a} + U_0 + \frac{1}{2} \sum_{jj';ab} C^{ab}(j-j') \hat{u}_j^a \hat{u}_{j'}^b. \quad (14.34)$$

Трансляционная инвариантность требует, как и в (14.5),

$$\sum_{nb} C^{ab}(n) = 0. \quad (14.35)$$

Уравнения движения имеют вид

$$\ddot{u}_j^a + \frac{1}{M_a} \sum_{j'b} C^{ab}(j-j') \hat{u}_{j'}^b = 0. \quad (14.36)$$

Мы вводим амплитуды с определённым квазиимпульсом  $\hat{B}_k^a(t) \propto \exp[-i\omega(k)t]$ , как в (14.9), и приходим к системе двух связанных уравнений:

$$\omega^2(k)\hat{B}_k^a = \frac{1}{M_a} \sum_b \hat{B}_k^b \left( \sum_n C^{ab}(n)e^{ikan} \right) \equiv \frac{1}{M_a} \sum_b \hat{B}_k^b C_k^{ab}. \quad (14.37)$$

Эта система даёт две ветви спектра (рис. 14.1, б):

$$\omega_{\pm}^2(k) = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{C_k^{aa}}{M_a} + \frac{C_k^{bb}}{M_b} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{C_k^{aa}}{M_a} - \frac{C_k^{bb}}{M_b} \right)^2 + \frac{4(C_k^{ab})^2}{M_a M_b}} \right]. \quad (14.38)$$

Их свойства можно понять в длинноволновом пределе. Из (14.35) следует, что в этом пределе

$$C_0^{aa} = C_0^{bb} = -C_0^{ab} \equiv C \quad (14.39)$$

и

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_-^2(k) = 0, \quad (14.40)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_+^2(k) = C \left( \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b} \right). \quad (14.41)$$

Нижняя ветвь (14.40), начинающаяся с нулевой частоты, это опять Голдстоуновская мода, и из (14.38) мы находим, что в этой моде  $\hat{B}^a = \hat{B}^b$  обе подрешётки движутся вместе, как единое целое. Верхняя ветвь начинается с конечной частоты (14.41), и соответствующие амплитуды удовлетворяют  $B^a M_a + B^b M_b = 0$ , т. е. центр масс элементарной ячейки остаётся в покое, и мы имеем только относительное движение двух атомов в ячейке в противофазе, которое определяется приведённой массой двух атомов. Нижняя, *акустическая*, ветвь соответствует звуковым волнам и имеет спектр, начинающийся с линейной зависимости  $\omega(k)$ , как можно увидеть из разложения при малых  $k$ . Верхняя, *оптическая*, ветвь с конечным  $\omega(0)$  — это аналог молекулярных колебаний, распространяющихся от одной ячейки к другой из-за трансляционной симметрии решётки.

Пусть имеется  $s$  атомов  $a = 1, \dots, s$  в ячейке  $\mathbf{j}$ ; их механика характеризуется векторами смещения  $\mathbf{u}_{\mathbf{j},a}$  из положений равновесия. Потенциальная энергия выражается подобно (14.3),

$$\hat{U} = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}\mathbf{j}';aa'} C_{\mathbf{j},a;\mathbf{j}'a'}^{\alpha\alpha'} \hat{u}_{\mathbf{j}a}^{\alpha} \hat{u}_{\mathbf{j}'a'}^{\alpha'} + \dots \quad (14.42)$$

Силловые константы, опять же зависящие от расстояний  $\mathbf{j} - \mathbf{j}'$ , теперь являются тензорами, где индексы  $\alpha, \dots$  относятся к декартовым компонентам, поскольку деформация решётки в процессе колебаний в общем случае анизотропна. Любое смещение решётки как целого по-прежнему не меняет её энергии, так что мы имеем, аналогично (14.5),

$$\sum_{\mathbf{j}'; a'} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{j} - \mathbf{j}') = 0. \quad (14.43)$$

Уравнения движения атомов в этом приближении линейны:

$$\ddot{u}_{\mathbf{j},a}^{\alpha} + \frac{1}{M_a} \sum_{\mathbf{j}'; a'} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{j} - \mathbf{j}') \hat{u}_{\mathbf{j}'a'}^{\alpha'} = 0. \quad (14.44)$$

Решения — опять блоховские волны с квазиимпульсом  $\mathbf{k}$ , но теперь, как в случае электромагнитного поля (разд. П.13.3), это *векторная* величина, так что нам нужно ввести операторы мод как векторы поляризации  $\hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k})$  для каждого (квантованного) значения  $\mathbf{k}$ . Априорно мы не знаем, куда направлены эти векторы. Поэтому мы ищем решения (14.44) для нормальных мод в виде

$$\hat{u}_{\mathbf{j},a}(\mathbf{k}, t) = \hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k}, t) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{j})}. \quad (14.45)$$

Квантование квазиимпульса подобно тому, что было в предыдущих моделях.

Компоненты векторных операторов  $\hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k})$  удовлетворяют уравнениям для связанных гармонических колебаний

$$\ddot{b}_a^{\alpha}(\mathbf{k}) + \frac{1}{M_a} \sum_{a'} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \hat{b}_{a'}^{\alpha'}(\mathbf{k}) = 0. \quad (14.46)$$

Здесь силловые константы  $C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})$  определены как в уравнении (14.14). Таким образом, для каждого значения  $\mathbf{k}$  мы получаем систему  $3s$ -уравнений. Частоты колебаний  $\omega$  получаются из

$$\text{Det} \left\{ C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) - \omega^2 M_a \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{aa'} \right\} = 0. \quad (14.47)$$

Поскольку из-за трансляционной инвариантности (14.43) имеется предельное свойство

$$\lim_{k \rightarrow 0} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{j}} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{j} - \mathbf{j}') = 0, \quad (14.48)$$

система уравнений (14.46) всегда имеет три решения с равными  $b^\alpha(0)$  для всех атомов  $a$  в ячейке, соответствующие нулевой частоте. Это наши знакомые голдстоуновские моды, описывающие произвольное бесконечно малое смещение кристалла в эквивалентное положение без изменения энергии. При  $\mathbf{k} \neq 0$  эти корни дают *акустические ветви* спектра колебаний, в которых не происходит нарушения структуры внутри ячейки, и ячейки движутся как единое целое. В кристаллах с одним атомом в элементарной ячейке существуют только эти ветви.

Остальные  $3(s - 1)$  ветвей спектра соответствуют *оптическим* колебаниям. В длинноволновом пределе они имеют конечные частоты, описывающие относительное движение атомов в ячейке, периодически повторяющееся в других ячейках. Векторные амплитуды  $\hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k})$  являются суперпозициями монохроматических волн с определёнными поляризациями. Мы можем идентифицировать нормальные моды по взаимно ортогональным векторам  $\mathbf{e}_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{(\lambda)}$ , которые находятся из уравнений (14.46) для каждого квазиимпульса  $\mathbf{k}$ , атома  $a$  в ячейке и собственной частоты  $\omega^2(\lambda\mathbf{k})$ .

#### Задача 14.4

Введите правильно нормированные (уравнение (14.30)) операторы рождения и уничтожения для фононных мод и выпишите операторное разложение для поля смещения  $\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{j}a}(t)$  в терминах фононов.

#### Решение.

Подобно уравнению (14.31), мы получаем

$$\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{j}a} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_a\omega_{\lambda\mathbf{k}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{(\lambda)} \left( \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}) - i\omega(\lambda\mathbf{k})t} + \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}) + i\omega(\lambda\mathbf{k})t} \right). \quad (14.49)$$

Мы не можем явно найти нормальные моды в общем виде для любого типа решётки. В некоторых случаях соображения симметрии помогают получить результат. В *кубической решётке* три ортогональных главных оси эквивалентны. Пусть волновой вектор  $\mathbf{k}$  смотрит вдоль одной из главных осей. Тогда симметрия показывает, что в случае одного атома в элементарной ячейке три нормальные моды  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)}$  соответствуют направлениям главных осей, так что имеется продольная волна и две вырожденных поперечных волны (с равными частотами). В длинноволновом пределе, аналогично (14.19), при  $s = 1$  мы получаем три типа звуковых волн со скоростью звука, зависящей от направления  $\mathbf{k}$  и поляризации  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)}$ . Учитывая высшие члены в разложениях (14.3, 14.34) и (14.42), мы получим *ангармонические* эффекты, которые приводят к *дисперсии* звука, зависи-

мости скорости звука от длины волны. Формально эти эффекты связаны с членами в гамильтониане, содержащими более двух операторов рождения и уничтожения фононов.

#### 14.4. Спиновые волны

Как мы обсуждали в разд. 12.4, требования квантовой статистики ведут к специфическому взаимодействию, зависящему от спинов, даже если гамильтониан системы тождественных частиц не содержит спиновых переменных явно. В этом причина правил Хунда (разд. 12.7), которые определяют электронный терм с наибольшим возможным спином  $S$  как энергетически наиболее выгодный среди всех значений спина, совместимых с принципом Паули для данной конфигурации.

Обменная часть электростатического взаимодействия ответственна за *коллективные магнитные явления*, ферромагнетизм и антиферромагнетизм. Хотя настоящий гамильтониан в конденсированной среде может быть очень сложным, основные черты могут быть описаны так называемым *гамильтонианом Гейзенберга*. Этот гамильтониан описывает взаимодействие локализованных атомных спинов таким же образом, как мы видели в простейшем случае (12.61)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ab(a \neq b)} J_{ab} (\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{s}}_b), \quad (14.50)$$

где *обменные интегралы*  $J_{ab} = J_{ba}$  зависят от расстояния между спинами  $a$  и  $b$  и обычно быстро убывают с ростом расстояния. В кристаллах они могут быть анизотропными, так что мы бы имели тензор  $J^{\alpha\beta}$  (мы не рассматриваем здесь такие случаи).

#### Задача 14.5

Рассмотрите систему  $N$  спинов  $1/2$  в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}(t) = b(t)\mathbf{n}$  фиксированного направления вдоль единичного вектора  $\mathbf{n}$ , но меняющегося со временем по величине. Спины взаимодействуют попарно с одинаковой силой взаимодействия  $J$  в каждой паре:

$$\hat{H}_{\text{int}}(a, b) = J(\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{s}}_b), \quad (14.51)$$

где  $a \neq b$ . Найдите перекрытие  $f(t) = \langle \Psi'(t) | \Psi(t) \rangle$  состояний, которые в начале были одним и тем же состоянием  $|\Psi_0\rangle$ , но подвергались воздействию

различных магнитных полей  $b'(t)$  и  $b(t)$  соответственно (такие величины характеризуют *точность воспроизведения* системы; они важны для оценки эффектов неизбежных возмущений).

### Решение.

Полагая гиромангнитное отношение отдельных спинов равным  $g$ , получим магнитный член гамильтониана

$$\hat{H}_m = -g\hbar \sum_a (\mathbf{B}(t) \cdot \hat{\mathbf{s}}_a) = -g\hbar b(t)(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \quad (14.52)$$

где  $\hat{\mathbf{S}}$  — полный спин системы. Легко видеть, что величина  $S$  сохраняется, поскольку все пары спинов взаимодействуют одинаково:

$$\sum_{ab(a \neq b)} \hat{s}_a^\mu \hat{s}_b^\mu = \frac{1}{2} (\hat{S}_\mu)^2 - \frac{N}{8}, \quad (14.53)$$

где  $\mu$  помечает оси координат (суммирование по  $\mu$  нет), и мы учли, что  $(\hat{s}_a^\mu)^2 = 1/4$  для всех  $a$  и  $\mu$ . Таким образом,

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{J}{2} \left( \hat{\mathbf{S}}^2 - \frac{3N}{4} \right). \quad (14.54)$$

Все классы состояний с различными значениями  $S$  эволюционируют независимо. Магнитная часть гамильтониана и член взаимодействия коммутируют, и оператор эволюции для поля  $b(t)$  равен

$$\hat{U}(t) = e^{-(i/\hbar) \int_0^t dt' \hat{H}(t')} = e^{i\{\Phi(t)(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}) + (J/2)[\mathbf{S}^2 - (3N/4)]t\}}, \quad (14.55)$$

где

$$\Phi(t) = g \int_0^t dt' b(t'). \quad (14.56)$$

Точность воспроизведения для начального состояния  $|\Psi_0\rangle$  выражается как

$$f = \langle \Psi_0 | (\hat{U}^\dagger)'(t) \hat{U}(t) | \Psi_0 \rangle, \quad (14.57)$$

где  $\hat{U}'$  и  $\Phi'(t)$  соответствуют возмущённой зависимости  $b'(t)$ . В нашем случае

$$f(t) = \langle \Psi_0 | e^{i[\Phi(t) - \Phi'(t)](\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}})} | \Psi_0 \rangle. \quad (14.58)$$

Для начального состояния с некоторой проекцией  $S_z = M$  на направление поля

$$f_M(t) = e^{i[\Phi(t) - \Phi'(t)]M} \equiv e^{i\alpha(t)M} \quad (14.59)$$

результат не зависит от знака  $J$ . Обычно практический интерес представляет средняя точность воспроизведения по начальным состояниям одного класса (спина  $S$ ),

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{2S+1} \sum_M f_M(t). \quad (14.60)$$

Суммирование геометрической прогрессии для целого  $S$  ведёт к

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{2S+1} \left\{ 1 + \frac{2 \cos[(S+1)\alpha/2] \sin(S\alpha/2)}{\sin(\alpha/2)} \right\}, \quad (14.61)$$

где  $\alpha(t)$  определено в (14.59). В случае малого возмущения  $S\alpha \ll 1$

$$\bar{f}(t) \approx 1 - \frac{S(S+1)}{6} \alpha^2(t). \quad (14.62)$$

Часть, не зависящая от времени, происходит от вклада состояния  $M = 0$ , на которое не влияет магнитное поле. Такой член отсутствует для полуцелых  $S$ , когда результат имеет вид

$$\bar{f}(t) = \frac{2 \cos[(2S+1)\alpha/4] \sin(S\alpha/2)}{(2S+1) \sin(\alpha/4)}. \quad (14.63)$$

На рис. 14.2 показан результат (14.61) как функция  $\alpha$  для различных значений  $S$ .

При положительных  $J_{ab}$  в основном состоянии все спины выстроены параллельно. Тогда спин основного состояния  $\mathbf{S} = \sum_a \mathbf{s}_a$  принимает максимально возможное значение  $S_{\max} = Ns$ , где мы считаем все спины равными, — материал является *ферромагнетиком*. Мы встречаем ситуацию, формально такую же, как в нашем обсуждении сверхизлучения в разд. II.11.9, где спины вводились искусственно для описания чисел заполнения атомных состояний. Основное состояние ферромагнетика сильно *вырождено*, поскольку все проекции  $S_z$  имеют одинаковую энергию. Это очевидное следствие *вращательной инвариантности*. Здесь мы видим ещё один пример спонтанно нарушенной симметрии (выше мы обсуждали нарушение трансляционной инвариантности). Внешнее магнитное поле сняло бы вырождение, определив предпочтительное направление выстра-

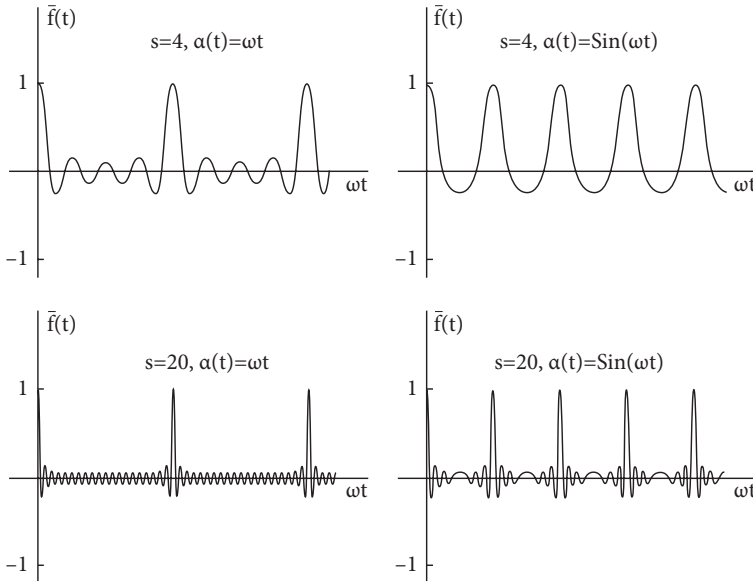


Рис. 14.2. Точность воспроизведения  $\tilde{f}(t)$  как функция возмущения  $\alpha(t)$ , уравнение (14.59), для  $S = 4$  и  $20$ , см. [78]

ивания спинов. Без поля все направления в пространстве эквивалентны. Фактическое основное состояние выбирается системой в зависимости от её истории, в результате каких-то возмущений в прошлом. Нужно ожидать Голдстоуновской моды в спектре возбуждений, связанной с бесконечно малыми поворотами, которые бесплатно переводят систему в состояние с другой эквивалентной ориентацией.

Простейший способ возбудить систему — это изменить ориентацию одного спина, скажем  $\mathbf{s}_a$ . Однако это не ведёт к стационарному состоянию, потому что выбранный спин взаимодействует с соседями. Переворачивая один спин, мы на самом деле возбуждаем *спиновую волну*, распространяющуюся по системе. Ферромагнитное основное состояние  $|0\rangle$  с  $S_z = S$  удовлетворяет

$$\hat{s}_a^z |0\rangle = s |0\rangle, \quad \hat{s}_a^{(+)} |0\rangle = 0 \text{ для всех } a. \quad (14.64)$$

Энергия основного состояния даётся формулой

$$E_0 = -\frac{s^2}{2} \sum_{ab(b \neq a)} J_{ab}, \quad (14.65)$$

где сумма берётся по всем взаимодействующим парам.

Чтобы увидеть, что происходит после переворота одного спина, запишем операторные уравнения движения для компонент  $\hat{s}_a^\alpha$ :

$$i\hbar\dot{s}_a^\alpha = [\hat{s}_a^\alpha, \hat{H}] = -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_{b(\neq a)} J_{ab} \hat{s}_b^\beta \hat{s}_a^\gamma. \quad (14.66)$$

Здесь мы использовали стандартные коммутационные соотношения для операторов спина и симметрию  $J_{ab}$ . Возьмём в операторных уравнениях (14.66) для поперечных компонент  $\alpha = x, y$  матричный элемент  $\langle \omega | \dots | 0 \rangle$  между основным состоянием и возбуждённым состоянием с энергией  $E = \hbar\omega$ . Мы ищем операторы, действующие как операторы рождения возбуждений и потому имеющие зависимость от времени  $\propto \exp(i\omega t)$ . В коммутаторе мы получаем  $-\hbar\omega \langle \omega | s_a^{x,y} | \omega \rangle$ , тогда как в правой части один из спиновых операторных множителей относится к  $z$ -компоненте и, действуя на основное состояние, даёт своё собственное значение  $s$ . В результате мы приходим к *линейной* системе уравнений:

$$\begin{aligned} -\hbar\omega \langle \omega | s_a^x | 0 \rangle &= -is \sum_{b(\neq a)} J_{ab} \langle \omega | s_b^y - s_a^y | 0 \rangle; \\ -\hbar\omega \langle \omega | s_a^y | 0 \rangle &= is \sum_{b(\neq a)} J_{ab} \langle \omega | s_b^x - s_a^x | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (14.67)$$

Нам нужно выбрать *понижающую* компоненту  $\hat{s}^{(-)} = \hat{s}_x - i\hat{s}_y$ , удовлетворяющую

$$\hbar\omega \langle \omega | s_a^{(-)} | 0 \rangle = s \sum_{b(\neq a)} J_{ab} \langle \omega | s_a^{(-)} - s_b^{(-)} | 0 \rangle. \quad (14.68)$$

Эта связанная система уравнений показывает, что существует ветвь спектра возбуждений, генерируемая переворотом отдельного спина и включающая все остальные спины через их взаимодействие.

Теперь вспомним трансляционную инвариантность,  $J_{ab} = J(|\mathbf{a} - \mathbf{b}|)$ . Вследствие этого стационарные состояния являются блоховскими волнами с некоторым квазиимпульсом  $\mathbf{k}$ . Оператор рождения  $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$  такого состояния должен быть суперпозицией локальных переворотов спинов с фазами, определяемыми квазиимпульсом

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_a \hat{s}_a^{(-)} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})}, \quad (14.69)$$

и временной зависимостью  $\propto \exp[i\omega(\mathbf{k})t]$ . Обратное преобразование, в соответствии с (14.28), — это

$$\hat{s}_a^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})}. \quad (14.70)$$

Таким же образом, как в уравнениях (14.13,14.14), мы вводим

$$J_{\mathbf{k}} = \sum_b J(\mathbf{a} - \mathbf{b}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a} - \mathbf{b})} = \sum_b J(\mathbf{b}) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b})}; \quad J_0 = \sum_b J(\mathbf{b}). \quad (14.71)$$

Координатная зависимость в виде бегущей волны воспроизводится во всех членах, и мы получаем энергетический спектр

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = s(J_0 - J_{\mathbf{k}}). \quad (14.72)$$

Легко видеть, что (в ферромагнитном случае)  $J_0 \geq J_{\mathbf{k}}$ , и энергия возбуждения (14.72) положительна. Как мы и ожидали,

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{\mathbf{k}} = 0, \quad (14.73)$$

что соответствует голдстоуновской моде, генерируемой оператором  $\sum_a s_a^{(-)}$  бесконечно малого глобального поворота всех спинов без изменения энергии.

### Задача 14.6

Найдите спектр спиновых волн для периодической линейной цепочки спинов с периодом  $a$  и взаимодействием ближайших соседей,  $J_{a,a+1} = J_{a+1,a} = J > 0$ . Рассмотрите длинноволновой предел точного решения.

#### Решение.

Уравнение (14.72) даёт

$$\hbar\omega_k = 2sJ(1 - \cos(ka)). \quad (14.74)$$

При  $ka \ll 1$  мы получаем закон дисперсии

$$\hbar\omega_k = sJa^2k^2, \quad (14.75)$$

начинающийся с нуля и подобный частице с эффективной массой  $\hbar^2/2Jsa^2$ , примерно на порядок тяжелее массы электрона.

Волновая функция спиновой волны может быть записана как

$$|\mathbf{k}\rangle = A\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}|0\rangle = \frac{A}{\sqrt{N}} \sum_a e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})} \hat{s}_a^{(-)}|0\rangle, \quad (14.76)$$

синхронизованная суперпозиция состояний с переворотом отдельных спинов.

### Задача 14.7

Нормируйте состояние спиновой волны соответственно

$$\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (14.77)$$

### Решение.

Нормировочный множитель в уравнении (14.73) равен  $A = 1/\sqrt{2s}$ .

Теперь мы можем ввести нормированные операторы рождения спиновой волны

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2sN}} \sum_a \hat{s}_a^{(-)} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})} \quad (14.78)$$

и определить сопряжённые операторы уничтожения, осуществляющие переход  $\langle 0|\cdots|\omega_{\mathbf{k}}\rangle$  обратно в основное состояние

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2sN}} \sum_a \hat{s}_a^{(+)} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})}. \quad (14.79)$$

Они удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \frac{1}{2sN} \sum_{ab} e^{i[(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})-(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{b})]} [\hat{s}_a^{(+)}, \hat{s}_b^{(-)}]. \quad (14.80)$$

Коммутатор в правой части уравнения (14.80) равен  $2s_a^z \delta_{ab}$ , так что

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \frac{1}{sN} \sum_a e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{a}} \hat{s}_a^z. \quad (14.81)$$

В любом симметричном по спином состоянию среднее значение  $\langle s_a^z \rangle$  не зависит от  $a$  и определяется средним значением полной проекции  $S_z$ ,

$$\langle \text{symm} | s_a^z | \text{symm} \rangle = \frac{\langle S_z \rangle}{N}. \quad (14.82)$$

Тогда суммирование по  $a$  в уравнении (14.81) даёт  $N\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ , и мы получаем коммутатор (14.81):

$$\langle \text{symm} | [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger] | \text{symm} \rangle = \frac{\langle S_z \rangle}{sN}. \quad (14.83)$$

В основном состоянии это точно 1, тогда как в состоянии спиновой волны мы вместо этого имеем  $(N - 1)/N$ . При очень больших  $N$  поправка пренебрежимо мала для всех состояний, где число перевёрнутых спинов мало по сравнению с полным числом  $N$ , и, игнорируя её, мы можем рассматривать квантованные спиновые волны как гармонические кванты, *магноны*. Роль поправки возрастает с числом возбуждённых магнонов. Это приводит к новому, *кинематическому*, взаимодействию магнонов, которое может быть описано [79] с помощью преобразования Холстейна—Примакова от спиновых операторов к бозонным (см. задачу II.1.8 и последующее обсуждение). Оно должно быть добавлено к нормальному *динамическому* взаимодействию, которое может предпочитать образование комплексов перевёрнутых спинов. Отличие от статистики Бозе особенно ярко выражено для спина  $s = 1/2$ . Действительно, в случае бозонов мы должны иметь возможность создать одно и то же возбуждение несколько раз. Однако для спина  $1/2$  возможен только один переворот, так что узел с перевёрнутым спином не может участвовать в дальнейших возбуждениях.

*Антиферромагнитный* случай  $J_{ab} < 0$  гораздо более сложен. Даже в случае взаимодействия только ближайших соседей и спина  $1/2$  определение основного состояния требует более мощных методов (*анзац Бёте*, 1931). Хотя ясно, что соседние спины предпочитают быть в синглетном состоянии пары, данный спин не может быть в синглетном состоянии с обоими соседями одновременно. Можно также упомянуть системы типа *квантового стекла*, где константы взаимодействия  $J_{ab}$  различных пар принимают случайные значения, включая случайный знак. Численные эксперименты вроде бы указывают, что в этом случае спин основного состояния может принимать любое значение, но в среднем он растёт с числом спинов  $\propto \sqrt{N}$ , как и можно было бы ожидать при случайных константах связи отдельных спинов.

## 14.5. Возбуждения частица–дырка

В однородном Ферми-газе простейшие возбуждения можно получить из основного состояния, перемещая частицу из моря Ферми в более высокое одночастичное состояние. Этот процесс создаёт пару из частицы выше

$\Sigma_F$  и дырки внутри  $\Sigma_F$ . Например, обменный процесс, показанный на рис. 13.4, b, можно интерпретировать как виртуальное рождение частицы  $(\mathbf{p}, \sigma)$  и дырки  $(\mathbf{p}', \sigma)$  при взаимодействии со внешней частицей  $(\mathbf{p}, \sigma)$ . После взаимодействия внешняя частица получает импульс  $\mathbf{p}'$  и заполняет свободное состояние дырки (аннигилирует с дыркой, как в теории Дирака), тогда как вторичная частица продолжает распространение.

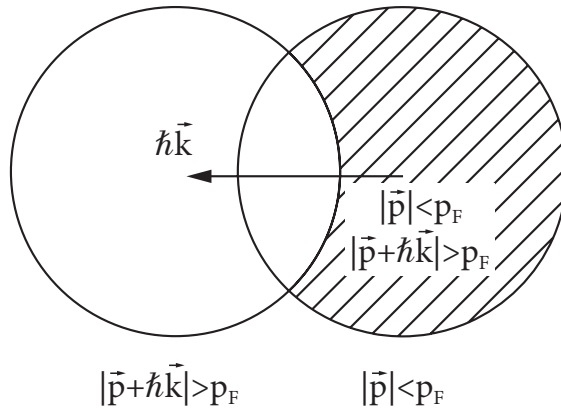


Рис. 14.3. Рождение пары частица–дырка внешним полем

Любое внешнее поле, сохраняющее число частиц, может рождать только парные возбуждения *частица–дырка*. Рассмотрим процесс, когда система получает импульс  $\mathbf{P}$ , и частица переходит в состояние  $\mathbf{p} + \mathbf{P}$  выше  $\Sigma_F$ , оставляя дырку в состоянии  $\mathbf{p}$  (рис. 14.3). Это состояние можно получить действием двух одночастичных операторов на невозмущённое основное состояние  $|0\rangle$  Ферми-газа

$$|\Phi^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P})\rangle = \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{P}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} |0\rangle. \quad (14.84)$$

Возбуждение может сохранить или перевернуть спин возбуждаемой частицы, но мы здесь опускаем спиновые индексы орбиталей частицы и дырки. Энергия возбуждения этого состояния с полным импульсом  $\mathbf{P}$  равна

$$E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P}) = \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{P})^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{P})}{m} + \frac{\mathbf{P}^2}{2m}. \quad (14.85)$$

Такое состояние возможно только при  $|\mathbf{p}| < p_F$  и  $|\mathbf{p} + \mathbf{P}| > p_F$ .

Найдём область возможных значений энергии возбуждения (14.85) как функцию полного импульса  $\mathbf{P}$  этого комплекса. Для данного значения

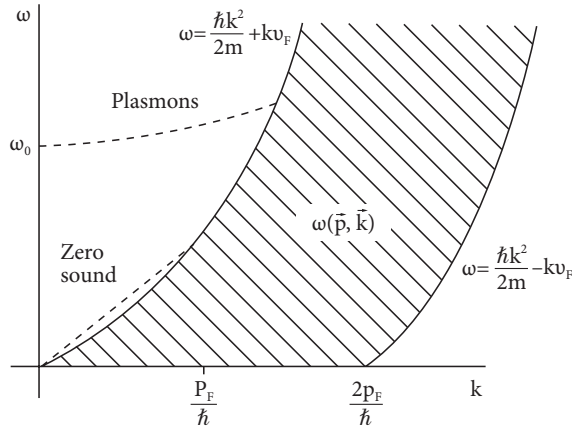


Рис. 14.4. Континуум состояний частица–дырка

**P** импульс дырки **p** может находиться внутри разности объёмов двух сфер Ферми, сдвинутых на  $-\mathbf{P}$  по отношению друг к другу (см. рис. 14.3). Различные углы между партнёрами в паре частица–дырка определяют (рис. 14.4) возможные значения энергии возбуждения:

$$0 < E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P}) \leq P v_F + \frac{P^2}{2m}, \quad P < 2p_F;$$

$$\frac{P^2}{2m} - P v_F \leq E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P}) \leq \frac{P^2}{2m} + P v_F, \quad P > 2p_F, \quad (14.86)$$

где  $v_F = p_F/m$  — скорость частицы на  $\Sigma_F$ . Два разных выражения появляются в (14.86), поскольку при  $P = 2p_F$  перекрытие между сферами Ферми на рис. 14.3 исчезает, и после этого нет никаких ограничений на состояния дырки, их можно брать в любом месте внутри  $\Sigma_F$ .

Энергии  $E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P})$  образуют *континуум* для каждого значения полного импульса **P** пары частица–дырка. В длинноволновом пределе  $P \ll p_F$  верхняя граница континуума приближённо является прямой линией с наклоном  $dE^\circ/dP = v_F$ . Все возможные возбуждения имеют групповую скорость меньше  $v_F$ . Если внешнее поле создаёт в Ферми-газе волну с волновым вектором **k** и частотой  $\omega$ , имеющую групповую скорость  $d\omega/dk < v_F$ , то такая волна оказывается в резонансе с некоторыми возбуждениями частица–дырка с той же скоростью внутри континуума. Любое слабое взаимодействие между ними привело бы к резонансной передаче энергии от внешней волны моде частица–дырка с теми же квантовыми числами. Это

взаимодействие быстро преобразовало бы энергию волны в возбуждения частица–дырка при выполнении законов сохранения энергии и импульса, и волна стала бы слабее (*затухание Ландау*). В противоположность этому, диссипация гораздо меньше для волн, энергия и импульс которых находятся вне континуума, поскольку она бы потребовала одновременного рождения нескольких пар частица–дырка, что значительно менее вероятно.

## 14.6. Флуктуации плотности

Взаимодействие между фермионами открывает возможность появления волновых возбуждений без затухания Ландау (вне континуума частица–дырка). Мы здесь рассмотрим класс таких волн, связанных с *флуктуациями плотности*. Характерный квантовый оператор — это флуктуация плотности

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \sum_a e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a)}. \quad (14.87)$$

Эрмитово сопряжённый оператор  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$  был введён в (I.7.112) и использовался для вывода правила сумм (I.7.113). Обратите внимание, что предельное значение

$$\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_0^{\dagger} = \hat{N} \quad (14.88)$$

— оператор числа частиц.

### Задача 14.8

Найдите выражение для оператора (14.87) во вторично-квантованном виде в базисе плоских волн.

#### Решение.

Оператор (14.87) — Фурье-компонента оператора плотности (11.41). По определению из разд. 11.6,

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}\sigma'\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}'\sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma} (\mathbf{p}'\sigma' | e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} | \mathbf{p}\sigma). \quad (14.89)$$

Интегрирование в матричном элементе даёт символы сохранения спина и импульса  $\delta_{\mathbf{p}',\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}}\delta_{\sigma'\sigma}$ , и в результате

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (14.90)$$

Действуя на основное состояние, оператор  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$  создаёт однородную комбинацию всех возбуждений типа частица–дырка, доступных в континууме рис. 14.4 вдоль вертикальной прямой с полным импульсом  $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}$ .

Мы предполагаем, что частицы взаимодействуют попарно через потенциал  $U(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)$ , зависящий от относительных координат пары,

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} = \sum_a \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ab} U(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b). \quad (14.91)$$

Такое взаимодействие можно выразить в терминах операторов флуктуации плотности

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\rho}_{\mathbf{k}} - \hat{N}), \quad (14.92)$$

где использовались определения (14.87) и (14.88) вместе с Фурье-компонентой  $U_{\mathbf{k}}$  потенциала взаимодействия

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}. \quad (14.93)$$

Оператор  $\hat{N}$  в (14.92) компенсирует добавленный член с  $\mathbf{r}_a = \mathbf{r}_b$ . Конечно, тот же результат легко вывести во вторичном квантовании (14.90).

Как и при выводе правил сумм (разд. I.7.9), мы используем тот факт, что операторные функции координат коммутируют с членом взаимодействия. Из кинетической энергии мы получаем уравнение движения для флуктуаций плотности

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{K}] = i \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right). \quad (14.94)$$

Этот универсальный результат не зависит от взаимодействия: каждая компонента флуктуаций плотности осциллирует со своей частотой, определяемой энергией возбуждения частица–дырка (14.86). Вычисление второй производной по времени уже включает взаимодействие через операторы импульса  $\hat{\mathbf{p}}_a$ , присутствующие в (14.94):

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger = - \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right)^2 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{\rho}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\dagger. \quad (14.95)$$

Эти точные нелинейные уравнения не могут быть решены точно. Мы применим *приближение случайных фаз* (ПСФ) [80], которое хорошо работает для описания коллективных мод в многочастичных системах.

### 14.7. Приближение случайных фаз

Мы хотим изолировать в точных уравнениях движения наиболее когерентные процессы, соответствующие волновому вектору  $\mathbf{k}$ .

Нелинейный (последний) член в (14.95) содержит такой вклад, происходящий от  $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ . Мы предполагаем, что взаимодействие между частицами является *отталкиванием*, так что  $U_{\mathbf{k}} > 0$  по крайней мере при малых  $k$ . Используя обозначение

$$\Omega_{\mathbf{k}}^2 = \frac{N}{V} k^2 U_{\mathbf{k}} \equiv n k^2 U_{\mathbf{k}}, \quad (14.96)$$

мы имеем

$$\begin{aligned} & \ddot{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \Omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ = & - \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right)^2 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} U_{\mathbf{k}'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \hat{\rho}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\dagger}. \end{aligned} \quad (14.97)$$

Первый член в правой части (14.97) содержит вклад отдельных возбуждений частица–дырка, сравните с (14.86). Рассмотрим большие длины волн,  $\hbar k \ll p_F$ . Поскольку континуум при малых  $k$  сжат вокруг  $\Sigma_F$ , мы можем оценить этот член в среднем

$$\sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right)^2 \approx \overline{(E^{\circ}(\mathbf{k}))^2} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \quad (14.98)$$

где мы выделили когерентный вклад слоя континуума для данного импульса  $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k}$  (см. энергию частично-дырочного континуума (14.86)). Нелинейные члены с  $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$  не имеют никакой когерентности. ПСФ пренебрегает этими членами и приводит к предсказанию коллективной моды с законом дисперсии

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = 0, \quad \omega_{\mathbf{k}}^2 = \Omega_{\mathbf{k}}^2 + \overline{(E^{\circ}(\mathbf{k}))^2}. \quad (14.99)$$

Важный случай соответствует кулоновскому взаимодействию электронов в твёрдых телах или плазме, где нулевая Фурье-компонента  $U_0$  исключается компенсирующим фоном. Но при  $\mathbf{k} \neq 0$ , в соответствии с (13.107), величина

$\Omega_{\mathbf{k}}$ , определённая в уравнении (14.96), переходит в *плазменную частоту*  $\omega_0$ , уравнение (13.78). Поскольку второй член в (14.99) порядка  $(kv_F)^2$  при малых  $k$ , мы приходим к заключению, что при больших длинах волн флуктуации плотности в кулоновском газе являются плазменными колебаниями, определяемыми электронейтральностью. На рис. 14.4 эта частота расположена выше континуума. Поэтому такие колебания имеют слабую диссипацию, которую можно вычислить через некогерентные члены, не учитываемые в ПСФ. Вычисление этого затухания требует более продвинутой техники. С ростом  $k$  дисперсионная кривая флуктуаций плотности идёт вверх и входит в континуум (рис. 14.4). Таким образом, затухание плазменных колебаний становится важным при  $k \sim \omega_0/v_F$ . Используя явные выражения для плазменной частоты и скорости Ферми, легко получить оценку критической длины волны колебаний  $\lambda_c \sim \sqrt{ar_0}$ , где  $a$  — боровский радиус, а  $r_0 \sim n^{-1/3}$  — среднее расстояние между электронами. Более короткие длины волн сильно затухают.

Конечное значение плазменной частоты при малых  $k$  является следствием дальнего действия кулоновского взаимодействия (особенность  $\sim 1/k^2$  в (13.107)). Записывая уравнение (14.99) для кулоновского случая в виде

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = \omega_0^2 + \xi k^2 v_F^2, \quad (14.100)$$

где  $\xi$  — численный коэффициент, близкий к 1, мы видим, что плазменная частота играет роль эффективной массы в «релятивистском» законе дисперсии кванта волны плотности, *плазмона*, — конечной энергии в длинноволновом пределе. Для потенциала  $U$  с конечной Фурье-компонентой  $U_0$ , как в газе нейтральных частиц, спектр осцилляций плотности *звукopodobный*, поскольку оба члена в (14.99) ведут себя как  $\propto k^2$ . Как упоминалось в разд. 13.6, плазменные колебания можно возбудить локальным нарушением нейтральности. При  $\delta\rho \propto \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$  электрическое поле  $\delta\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$  является *продольным* по отношению к волновому вектору  $\mathbf{k}$ . В некотором смысле, соответствующий квант, плазмон, является продольным аналогом поперечного фотона. Это возможно только в материальной среде, и в противоположность безмассовому фотону плазмон имеет ненулевую эффективную массу.

## 14.8. Электрон-фононное взаимодействие

Появление коллективных степеней свободы ведёт к качественно новым физическим явлениям. *Сверхпроводимость* металлов (гл. 16) возникает из-

за эффективного *притяжения*, которое должно быть достаточно сильным, чтобы преодолеть кулоновское отталкивание. Как впервые было отмечено Г. Фрелихом [81], механизм притяжения появляется благодаря взаимодействию электронов с квантами колебаний решётки — фононами. Если ион слегка смещается от своего равновесного положения в кристаллической решётке, то электроны испытывают дополнительное притяжение к избытку положительного заряда и, следовательно, друг к другу. Но смещение одного атома вызывает также смещение других атомов, и фактически должно рассматриваться как распространяющаяся упругая волна — фонон. На квантовом языке такое эффективное электрон-электронное взаимодействие трактуется как обмен фононами. Определённая неустойчивость нормальной поверхности Ферми относительно притяжения вызывает фазовый переход в сверхпроводящее состояние. Возможно, что в высокотемпературных сверхпроводниках важен обмен между электронами квантами типа магнонов.

Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия следует непосредственно из нашего обсуждения фононов в разд. 14.3. Потенциал, действующий на электрон в невозмущённой идеальной решётке, равен сумме членов  $U(\mathbf{r} - \mathbf{j})$ , где  $\mathbf{r}$  — положение электрона, а  $\mathbf{j}$  — равновесная координата узла решётки  $\mathbf{j}$ . При смещении атома  $a$  в узле  $\mathbf{j}$  на величину  $\mathbf{u}_{\mathbf{j}a}$  возмущение может быть записано как

$$\hat{H}'(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{j};a} (F_a(\mathbf{r} - \mathbf{j}) \cdot \hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{j}a}), \quad (14.101)$$

где  $\mathbf{F}_a = -\nabla U_a$  — градиент потенциала иона. Смещение  $\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{j}a}$  должно быть выражено как сумма (14.49) операторов рождения и уничтожения фононов. Для смещений, малых по сравнению с периодом решётки, можно ограничиться линейным членом в разложении потенциала возмущения. Кроме того, мы пренебрегаем процессами с переворотом спина электрона. Взаимодействие (14.101) описывает процессы рассеяния электрона на решётке с излучением или поглощением одного кванта фонона.

Рассмотрим для примера процесс поглощения фонона типа  $(\lambda\mathbf{q})$ , сопровождаемый электронным переходом. В общем случае квантовые числа электрона — квазиимпульс  $\mathbf{k}$  и номер зоны  $n$  меняются на  $\mathbf{k}'$  и  $n'$ . Пользуясь разложением по нормальным модам (14.49), находим матричный элемент

$$\langle \mathbf{k}'n' | \hat{H}' | \mathbf{k}n; \mathbf{q}\lambda \rangle = - \sum_{\mathbf{j};a} \sqrt{\frac{\hbar N_{\mathbf{q}\lambda}}{2NM_a\omega(\lambda\mathbf{q})}} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{j})} \times$$

$$\times \int d^3r \psi_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) (\mathbf{F}_a(\mathbf{r} - \mathbf{j}) \cdot \mathbf{e}_{a\mathbf{q}}^{(\lambda)}) \psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}), \quad (14.102)$$

где  $N_{\mathbf{q}\lambda}$  — начальные числа заполнения фононов. Матричный элемент излучения фонона содержит вместо них фактор  $\sqrt{1 + N_{\mathbf{q}\lambda}}$ . В части электронного матричного элемента, содержащей определённый узел решётки  $\mathbf{j}$ , можно поместить начало координат в этот узел,  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{j}$ , и воспользоваться теоремой Блоха (I.8.60) для волновой функции электрона

$$\psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r} + \mathbf{j}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{j})} \psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}), \quad \psi_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r} + \mathbf{j}) = e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{j})} \psi_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}). \quad (14.103)$$

Это приводит матричный элемент (14.102) к виду

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'n' | \hat{H}' | \mathbf{k}n; \mathbf{q}\lambda \rangle = & - \sum_a \sqrt{\frac{\hbar N_{\mathbf{q}\lambda}}{2NM_a\omega(\lambda\mathbf{q})}} \sum_{\mathbf{j}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{j}} \times \\ & \times \int d^3r \psi_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) (\mathbf{F}_a(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{e}_{a\mathbf{q}}^{(\lambda)}) \psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (14.104)$$

Сумма экспонент не исчезает, если сумма волновых векторов в показателе экспонент совпадает с вектором  $\mathbf{K}$  обратной решётки (см. разд. I.8.6):

$$\sum_{\mathbf{j}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{j}} = N\delta_{\mathbf{q}+\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{K}}. \quad (14.105)$$

Для простоты мы будем рассматривать случай  $\mathbf{K} = 0$  (ненулевые векторы  $\mathbf{K}$  важны при вычислении сопротивления и при описании установления теплового равновесия). В этом случае мы имеем сохранение квазиимпульса  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ .

Диагональные члены  $(\mathbf{k}n) = (\mathbf{k}'n')$  соответствуют фононному вектору  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ , т. е. акустической моде смещения решётки как целого. По этой причине матричный элемент взаимодействия должен исчезать при  $q \rightarrow 0$ . Это имеет место для акустической ветви, где каждый узел сдвигается без изменения внутренней структуры ячейки (см. задачу 14.3). Действительно, из (14.102) мы видим, что в диагональном случае интеграл содержит

$$I_{\mathbf{k}n} = \int d^3r |\psi_{\mathbf{k}n}|^2 \sum_{\mathbf{j};a} \nabla U_a(\mathbf{r} - \mathbf{j}) \cdot \mathbf{e}_a, \quad (14.106)$$

где  $|\psi_{\mathbf{k}n}|^2$ , согласно теореме Блоха, одинакова во всех ячейках решётки. Оставшаяся сумма есть изменение энергии при смещении решётки как

целого, т. е.  $I_{kn} = 0$ . Это значит, что весь матричный элемент исчезает при  $q \rightarrow 0$ , будучи фактически пропорциональным  $q$  или для акустических волн  $\propto \sqrt{\omega}$ , поскольку константа нормировки содержит  $1/\sqrt{\omega}$ .

Для понимания механизма эффективного притяжения между электронами нужно рассмотреть процесс обмена виртуальным акустическим фононом. Для простоты мы будем рассматривать только внутризонные электронные переходы с  $\mathbf{K} = 0$ . При нулевой температуре реальные фононы отсутствуют  $N_{\mathbf{q}\lambda} = 0$ , тогда взаимодействие между электронами осуществляется через излучение фонона одним из электронов с последующим поглощением его другим электроном, что соответствует второму порядку теории возмущений. В основном состоянии оба электрона находятся внутри поверхности Ферми,  $|\mathbf{k}_1|$  и  $|\mathbf{k}_2|$  оба  $\leq k_F$ . Промежуточные состояния содержат два электрона и виртуальный фонон. Излучающий электрон, имеющий первоначальный импульс  $\mathbf{k}_1$ , приобретает импульс  $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}$ , в то время как партнёр поглощает фонон и испытывает переход  $\mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}$ . Энергетические знаменатель в этом случае равен  $\varepsilon(\mathbf{k}_1) - \hbar\omega(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q})$ . Далее мы должны добавить процесс, в котором фонон  $-\mathbf{q}$  излучается электроном с первоначальным импульсом  $\mathbf{k}_2$  и поглощается электроном  $\mathbf{k}_1$ , давая то же конечное состояние. Второй энергетический знаменатель равен  $\varepsilon(\mathbf{k}_2) - \hbar\omega(-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q})$ . Так как  $\omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$ , квадраты матричных элементов равны, и мы должны вернуться в основное состояние, т. е.

$$\varepsilon(\mathbf{k}_1) + \varepsilon(\mathbf{k}_2) = \varepsilon(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}). \quad (14.107)$$

Сумма этих вкладов пропорциональна выражению

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}_1) - \hbar\omega(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_1)} + \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}_2) - \hbar\omega(\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q})} = \\ & = \frac{2\hbar\omega(\mathbf{q})}{[\varepsilon(\mathbf{k}_1) - \varepsilon(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q})]^2 - \hbar^2\omega^2(\mathbf{q})}. \end{aligned} \quad (14.108)$$

Чтобы получить поправку второго порядка к энергии основного состояния, это выражение вместе с квадратом матричного элемента  $|H'_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2$  должно быть просуммировано по всем одночастичным состояниям, занятым электронами в основном состоянии. Если разность электронных энергий мала по сравнению с энергией фонона, то результат может быть аппроксимирован отрицательной константой. Таким образом, вблизи  $\Sigma_F$  имеется область, где индуцированное фононами взаимодействие соответствует притяжению. Толщина этого слоя определяется максимальными акустиче-

скими частотами  $\hbar\omega \sim \varepsilon_F(m/M)^{1/2}$ . Соответствующая неопределённость в импульсе электрона  $\Delta p \sim \hbar\omega/v_F$  указывает, что это взаимодействие имеет радиус действия

$$\Delta x \sim \frac{v_F}{\omega} \sim \frac{v_F}{v_{\text{sound}}} \frac{v_{\text{sound}}}{\omega} \sim \sqrt{\frac{M}{m}} a \gg a, \quad (14.109)$$

где  $a$  — период решётки. Это дальнедействующее притяжение конкурирует с короткодействующим (экранированным, см. разд. 13.6) кулоновским отталкиванием в металлах. Если притяжение превалирует, то нормальное распределение Ферми оказывается неустойчивым. Поверхность Ферми размывается, и система становится *сверхпроводящей*.

**Дополнительная литература:** [80], [82], [83], [84], [85]



Уникальность конденсата Бозе—Эйнштейна в том, что он представляет собой чисто квантостатистический фазовый переход, иначе говоря, он реализуется даже при отсутствии взаимодействия. Эйнштейн определял этот переход как конденсацию «без участия сил притяжения»... С другой стороны реальные частицы всегда взаимодействуют, и поведение даже слабо взаимодействующего Бозе-газа отличается от поведения идеального Бозе-газа.

*В. Кеттерле. Нобелевская лекция 2001 г.*

## Глава 15

### Бозоны

#### 15.1. Бозе—Эйнштейновская конденсация

Как мы кратко упоминали в разд. 9.3, газ невзаимодействующих бозонов при низкой температуре переходит в фазу с *макроскопическим* заполнением низшего одночастичного состояния. Конечно, это должно произойти даже для классического газа различных частиц, но только при чрезвычайно низкой температуре, сравнимой с расстоянием до первого возбуждённого одночастичного уровня,  $T \sim \hbar^2/mV^{2/3}$ , где  $V$  — объём системы. В квантовом Бозе-газе эффекты неразличимости делают эту температуру (9.9) больше в  $\sim N^{2/3}$  раз, где  $N$  — число частиц.

Изучение свойств Бозе-газа при конечной температуре  $T$  — это задача статистической физики. Здесь нас будет интересовать чисто квантовый предел  $T = 0$ , когда все невзаимодействующие частицы образуют *Бозе—Эйнштейновский конденсат* (БЭК), т. е. занимают низшую орбиталь, и один одночастичный квантовый уровень имеет огромное число заполнения  $N_0 = N$ . В реалистических системах частицы взаимодействуют. Первый вопрос, на который нужно ответить, — выживает ли конденсат при наличии взаимодействия между частицами.

Сначала попробуем учесть эффекты взаимодействия по теории возмущений. Рассмотрим пространственно однородную систему тождественных бесспиновых бозонов в *термодинамическом* пределе очень больших  $V$  и  $N$ . В невозмущённом основном состоянии  $|0\rangle$  все частицы занимают одночастичный уровень с низшей энергией. С периодическими граничными

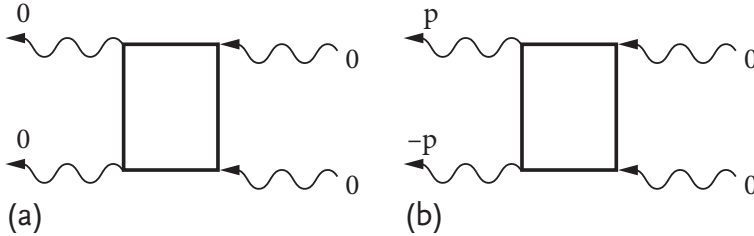


Рис. 15.1. Процессы рассеяния: а — частиц конденсата; б — создание занятых состояний  $\mathbf{p}$  и  $-\mathbf{p}$  выше конденсата

условиями эта орбиталь характеризуется нулевым импульсом  $\mathbf{p} = 0$  и нулевой энергией, так что волновая функция конденсата — это просто константа  $1/\sqrt{V}$ . Взаимодействие  $U(\mathbf{r})$  между частицами вызывает процессы рассеяния. В первом порядке теории возмущений нам нужно только среднее значение энергии взаимодействия между частицами конденсата. Применяя уравнение (11.75), мы вычисляем (рис. 15.1, а)

$$E_0 = \frac{1}{2V} U_0 \langle 0 | \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger a_0 a_0 | 0 \rangle. \quad (15.1)$$

Оператор здесь равен  $\hat{N}_0(\hat{N}_0 - 1)$ , так что вклад взаимодействия в конденсате в энергию основного состояния  $\langle \hat{N}_0 \rangle = N$  равен

$$E_0 = \frac{1}{2} U_0 \frac{N(N-1)}{V}. \quad (15.2)$$

Как и должно быть, в термодинамическом пределе с фиксированной плотностью  $n = N/V$  эта энергия  $E_0 \approx (1/2)U_0 n N$  пропорциональна числу частиц (*экстенсивная* величина). Здесь и далее мы предполагаем, что нулевая Фурье-компонента потенциала взаимодействия  $U_0$  конечна, что верно для нейтральных атомов.

В следующем приближении нам нужны *недиагональные* матричные элементы оператора взаимодействия. Единственный процесс, разрешённый сохранением импульса, показан на рис. 15.1, б — это столкновение двух конденсатных частиц, создающее пару  $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$ . Невозмущённая энергия этого состояния равна  $2(p^2/2m)$ , и матричный элемент перехода выражается формулой

$$M_{\mathbf{p}} = \langle 0_{N-2}; \mathbf{p}, -\mathbf{p} | \hat{U} | 0_N \rangle, \quad (15.3)$$

где мы указываем число частиц в конденсате. Применяя снова уравнение (11.75), мы находим

$$M_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2V} \langle 0_{N-2} | \hat{a}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 | 0_N \rangle = \frac{\sqrt{N(N-1)}}{V} U_{\mathbf{p}}. \quad (15.4)$$

Поэтому в линейном приближении по взаимодействию основное состояние приобретает примесь состояний с одной парой  $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$  над конденсатом, и амплитуда этого смешивания равна

$$\alpha(\mathbf{p}) = -\frac{M_{\mathbf{p}}}{2(\mathbf{p}^2/2m)} = -\frac{m}{p^2} \frac{\sqrt{N(N-1)}}{V} U_{\mathbf{p}}. \quad (15.5)$$

Квантованный вектор  $\mathbf{p}$  для небольшого импульса может быть представлен как  $(2\pi\hbar V^{-1/3})\vec{\nu}$ , где безразмерный вектор  $\vec{\nu}$  имеет целочисленные компоненты порядка единицы. Поскольку существенные импульсы малы, удобно ввести *длину рассеяния*  $a$  (разд. 2.7), которая в борновском приближении описывается выражением

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} f(k) = \frac{m}{4\pi\hbar^2} U_0. \quad (15.6)$$

Здесь мы учли, что приведённая масса в столкновении двух тождественных частиц массы  $m$  равна  $m/2$ . В этих обозначениях мы получаем для амплитуды смешивания (15.5)

$$\alpha(\mathbf{p}) = -\frac{\sqrt{N(N-1)}}{\pi\vec{\nu}^2} \frac{a}{V^{1/3}} \frac{U_{\mathbf{p}}}{U_0}. \quad (15.7)$$

Для типичного расстояния между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3}$  и гладкого потенциала  $U_{\mathbf{p}} \sim U_0$  мы приходим к оценке

$$|\alpha(\mathbf{p})| \sim \frac{a}{r_0} N^{2/3}. \quad (15.8)$$

Следовательно, в термодинамическом пределе теория возмущений никогда не применима, поскольку её применимость потребовала бы  $a \ll r_0/N^{2/3}$ , что может быть справедливо только при  $a = 0$ . Как ясно из уравнения (15.4), этот результат является следствием эффекта стимулированного усиления любого процесса, который возбуждает частицы из макроскопически заполненного Бозе-конденсата, тот же эффект, что и в лазерах. Даже в случае взаимодействия, являющегося слабым в смысле обычного борновского

приближения в *двухчастичной* задаче, теория возмущений для *многочастичной* системы не работает, и нам нужны более точные теоретические инструменты.

## 15.2. Конденсат как резервуар; химический потенциал

Чтобы выяснить, что происходит с конденсатом и низколежащими возбуждёнными состояниями в присутствии взаимодействия, мы предположим, что в системе со взаимодействием (которое мы по-прежнему считаем слабым) конденсат выживает [86] — всё ещё макроскопически большое число частиц  $N_0$  занимают одночастичную орбиту с  $\mathbf{p} = 0$ . Это предположение нужно будет проверить по результатам.

Для очень большого числа  $N_0$  операторы  $\hat{a}_0$  и  $\hat{a}_0^\dagger$  могут рассматриваться как  $c$ -числа (сравните с нашими аргументами насчёт макроскопической квантовой когерентности, гл. I.14). Разница между  $N_0$  и  $N_0 + 1$  пренебрежима, и коммутатором

$$[\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger] = (\hat{N}_0 + 1) - \hat{N}_0 = 1 \quad (15.9)$$

можно пренебречь по сравнению с  $N_0$ . В истинном основном состоянии  $N_0$  не имеет определённого значения, поскольку процессы рассеяния (рис. 15.1, б) удаляют пары частиц из конденсата. Однако среднее значение  $\langle N_0 \rangle$  этой флуктуирующей величины остаётся макроскопически большим во всех слабовозбуждённых состояниях. Поэтому мы можем положить (для шрёдингеровских операторов, не зависящих от времени)

$$\hat{a}_0 \approx \hat{a}_0^\dagger \Rightarrow \sqrt{N_0}, \quad (15.10)$$

где мы опустили скобки в  $\langle N_0 \rangle$ .

Таким образом, частицы с ненулевыми импульсами живут в контакте с макроскопическим *резервуаром* конденсатных частиц. Гамильтониан (11.75) даёт точные уравнения движения для гейзенберговских операторов бозонов:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{a}}_{\mathbf{p}} &= [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{H}] = \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}' \mathbf{p}} (U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{P}/2} + U_{-\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}) \hat{a}_{-\mathbf{p}+\mathbf{P}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2} \hat{a}_{\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}, \quad (15.11) \end{aligned}$$

$$i\hbar\dot{\hat{a}}_{\mathbf{p}}^{\dagger} = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} - \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{P}}(U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{P}/2} + U_{-\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2})\hat{a}_{\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}^{\dagger}\hat{a}_{-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}^{\dagger}\hat{a}_{-\mathbf{p}+\mathbf{P}}. \quad (15.12)$$

Частный случай этих точных уравнений для частиц конденсата  $\mathbf{p} = 0$  есть

$$[\hat{a}_0, \hat{H}] = \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{p}\mathbf{P}}(U_{\mathbf{p}+\mathbf{P}/2} + U_{\mathbf{p}-\mathbf{P}/2})\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{P}/2}\hat{a}_{-\mathbf{p}+\mathbf{P}/2}. \quad (15.13)$$

Выделим в сумме в уравнении (15.13) вклады, содержащие конденсатные операторы:

$$i\hbar\dot{\hat{a}}_0 = \frac{U_0}{V}\hat{a}_0^{\dagger}\hat{a}_0\hat{a}_0 + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}\neq 0}\left\{U_{\mathbf{p}}\hat{a}_0^{\dagger}\hat{a}_{-\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}} + (U_0 + U_{\mathbf{p}})\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{p}}\hat{a}_0\right\} + \widetilde{\sum}, \quad (15.14)$$

где  $\widetilde{\sum}$  не содержит конденсатных операторов. Пренебрегая этими членами, относительно маленькими при  $N_0 \gg 1$ , можно искать решение уравнения (15.14) и сопряжённого уравнения для  $\dot{\hat{a}}_0^{\dagger}$  в виде

$$a_0(t) = \sqrt{N_0}e^{-(i/\hbar)\mu t}, \quad a_0^{\dagger} = \sqrt{N_0}e^{(i/\hbar)\mu t}, \quad (15.15)$$

где амплитуды, в духе предыдущих аргументов, представлены как  $c$ -числа, а частота  $\mu$ , связанная с уничтожением или рождением конденсатной частицы, может быть найдена из уравнения (15.14), усреднённого по основному состоянию,

$$\mu = \frac{U_0}{V}N_0 + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}\neq 0}\left\{U_{\mathbf{p}}\Delta_{\mathbf{p}} + (U_0 + U_{\mathbf{p}})n_{\mathbf{p}}\right\}. \quad (15.16)$$

Здесь мы ввели числа заполнения надконденсатных частиц  $\mathbf{p} \neq 0$

$$n_{\mathbf{p}} = \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle \quad (15.17)$$

и *аномальное* среднее значение

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \langle \hat{a}_{-\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle e^{2(i/\hbar)\mu t}, \quad (15.18)$$

которое не зануляется в присутствии конденсата, способного поглощать или производить пары частиц с нулевым полным импульсом. Позже мы увидим, что оба средних значения (15.17) и (15.18) по основному состоянию системы не зависят от времени.

Поскольку

$$\langle N_0 - 1 | [\hat{a}_0, \hat{H}] | N_0 \rangle = (E_{N_0} - E_{N_0-1}) \langle N_0 - 1 | \hat{a}_0 | N_0 \rangle, \quad (15.19)$$

конденсатная частота (15.15) описывает изменение энергии, связанное с извлечением частицы из конденсата:

$$\mu = E_{N_0} - E_{N_0-1} \approx \frac{\partial E}{\partial N_0}. \quad (15.20)$$

В самом деле, главный вклад в среднюю энергию конденсата даётся членом (15.1) в гамильтониане, содержащим наибольшее число конденсатных операторов, замененных  $c$ -числами в соответствии с (15.10):

$$E_0 \approx \frac{1}{2V} U_0 N_0^2. \quad (15.21)$$

Производная этого члена по  $N_0$  совпадает с первым членом в уравнении (15.16). Следующий член возникает из-за вкладов в гамильтониан, содержащих два конденсатных оператора.

Таким образом, мы вводим  $\mu$  как *химический потенциал* конденсата. Как обычно в статистической механике, такие величины используются в задачах с переменным числом частиц. Поскольку точное основное состояние должно быть суперпозицией состояний с разными числами частиц в конденсате, нам нужен параметр такого типа, чтобы иметь возможность регулировать в среднем полное число частиц

$$N = N_0 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} n_{\mathbf{p}}. \quad (15.22)$$

### 15.3. Слабо неидеальный газ

Чтобы найти свойства основного состояния и спектр возбуждений, вернёмся к уравнениям движения (15.11) и (15.12) для  $\mathbf{p} \neq 0$ . В нелинейных членах в правой части сохраним главные вклады, содержащие два конденсатных оператора. Это эквивалентно приближению *слабо неидеального* Бозе-газа с химическим потенциалом (15.16), упрощённым до первого члена:

$$\mu \approx U_0 \frac{N_0}{V} \equiv n_0 U_0. \quad (15.23)$$

Таким образом, мы приходим к системе уравнений ( $\mathbf{p} \neq 0$ )

$$i\hbar\dot{\hat{a}}_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{V}\left\{(U_0 + U_{\mathbf{p}})\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_{\mathbf{p}} + U_{\mathbf{p}}\hat{a}_0\hat{a}_0\hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger\right\}, \quad (15.24)$$

$$i\hbar\dot{\hat{a}}_{-\mathbf{p}}^\dagger = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger - \frac{1}{V}\left\{(U_0 + U_{\mathbf{p}})\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger + U_{\mathbf{p}}\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_{\mathbf{p}}\right\}. \quad (15.25)$$

Здесь в правой части мы имеем конденсатные операторы с их зависимостью от времени (15.15). Мы можем искать решение в виде

$$\hat{a}_{\mathbf{p}}(t) = e^{-(i/\hbar)\mu t}\hat{A}_{\mathbf{p}}(t), \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger(t) = e^{(i/\hbar)\mu t}\hat{A}_{\mathbf{p}}^\dagger(t). \quad (15.26)$$

Тогда зависимость от времени, связанная с химическим потенциалом, сократится, и мы можем подставить  $c$ -числа  $\sqrt{N_0}$  вместо конденсатных операторов. В результате мы получаем *линейную* систему связанных уравнений:

$$i\hbar\dot{\hat{A}}_{\mathbf{p}} = [\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\hat{A}_{\mathbf{p}} + n_0U_{\mathbf{p}}\hat{A}_{-\mathbf{p}}^\dagger, \quad (15.27)$$

$$i\hbar\dot{\hat{A}}_{-\mathbf{p}}^\dagger = -[\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\hat{A}_{-\mathbf{p}}^\dagger - n_0U_{\mathbf{p}}\hat{A}_{\mathbf{p}}. \quad (15.28)$$

Здесь мы использовали обозначения

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu, \quad n_0 = \frac{N_0}{V}. \quad (15.29)$$

Решения уравнений (15.27–15.28) — это *нормальные моды* Бозе-газа. Из одного и того же состояния с одним квантом  $|\mathbf{p}\rangle$  можно получить основное состояние, либо понижая ( $\sim \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_{\mathbf{p}}$ ) частицу с импульсом  $\mathbf{p}$  в конденсат, либо повышая ( $\sim \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger\hat{a}_0$ ) из конденсата партнёра  $-\mathbf{p}$  для пары  $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$ . В обоих случаях мы получаем состояние с нулевым полным импульсом, но с разными числами частиц в конденсате,  $N_0 + 1$  и  $N_0 - 1$  соответственно. Основное состояние содержит комбинацию таких практически неразличимых компонент, и в обеих амплитудах конденсатный оператор можно заменить соответствующей константой. Взяв матричные элементы между основным состоянием  $|0\rangle$  и состоянием с одним квантом возбуждения (импульс  $\mathbf{p}$  и энергия относительно основного состояния  $E_{\mathbf{p}}$ ), мы получим

$$E_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = [\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\langle 0|\hat{A}_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle + n_0U_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{-\mathbf{p}}^\dagger|\mathbf{p}\rangle, \quad (15.30)$$

$$E_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{-\mathbf{p}}^\dagger|\mathbf{p}\rangle = -[\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\langle 0|\hat{A}_{-\mathbf{p}}^\dagger|\mathbf{p}\rangle - n_0U_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle. \quad (15.31)$$

Потребовав, чтобы детерминант этой системы алгебраических уравнений обращался в нуль, мы получим энергетический спектр возбуждений  $E_{\mathbf{p}}^{\pm}$  с двумя возможными знаками перед квадратным корнем. По определению, энергия возбуждения должна быть положительной, так что физический корень — это

$$E_{\mathbf{p}} = \sqrt{[\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]^2 - (n_0 U_{\mathbf{p}})^2} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0 U_0)^2 + 2(\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0 U_0)U_{\mathbf{p}}}. \quad (15.32)$$

Вспоминая значение химического потенциала (15.23) в этом приближении, мы получаем

$$E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{m} n_0 U_{\mathbf{p}}}. \quad (15.33)$$

Отрицательный корень той же системы уравнений соответствует матричному элементу  $\langle -\mathbf{p} | \cdots | 0 \rangle$ ; такие переходы опять могут быть произведены либо оператором  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ , либо  $\hat{a}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}$ .

#### 15.4. Фононы

Мы нашли спектр элементарных возбуждений в Бозе-газе со слабым взаимодействием. Если Фурье-компоненты взаимодействия  $U_{\mathbf{p}}$  не возрастают слишком сильно с ростом импульса, то при достаточно больших импульсах этот спектр сводится к спектру отдельных частиц, возбуждённых из конденсата

$$E_{\mathbf{p}} \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (15.34)$$

Однако в пределе *больших длин волн* второй член под знаком корня становится главным, и спектр является *линейной* функцией импульса:

$$E_{\mathbf{p}} \approx c p, \quad c = \sqrt{\frac{n_0 U_0}{m}}. \quad (15.35)$$

Таким образом, взаимодействие превращает некогерентное движение частиц в *звуковые волны* со скоростью звука  $c$ , определяемой плотностью конденсата и объёмным интегралом от взаимодействия  $U_0$ , или длиной рассеяния (15.6). Решение в целом оказывается физически разумным только в случае *отталкивания* с  $U_0 > 0$ . Тогда частицы не образуют двухчастичных связанных состояний. В случае притяжения Бозе-газ был бы нестабилен по отношению к образованию таких связанных комплексов.

### Задача 15.1

Решите задачу о спектре возбуждений в приближении среднего поля. Это можно сделать путём более тщательного решения уравнений (15.11) и (15.12): произведите линеаризацию, учитывая вдобавок к членам с двумя конденсатными операторами также средние значения  $\Delta_{\mathbf{p}}$  и  $n_{\mathbf{p}}$ , уравнения (15.17) и (15.18). Одновременно с этим нужно более точное выражение (15.16) для химического потенциала. Покажите, что в таком согласованном подходе спектр сохраняет качественные черты, найденные в приближении слабо взаимодействующего газа, а именно переход между двумя режимами (15.34) и (15.35) с фононным спектром при малых импульсах.

Переход между двумя типами спектра возбуждений, корпускулярным (15.34) и волновым (15.35), рис. 15.2, происходит при длинах волн, соответствующих

$$p_c \sim mc \sim \sqrt{mnU_0} \sim \hbar\sqrt{na} \rightsquigarrow \lambda \sim \sqrt{\frac{1}{na}} \sim r_0\sqrt{\frac{r_0}{a}}. \quad (15.36)$$

Обычно  $r_0 \gg a$ , иначе систему нельзя назвать газом, она ближе к сильно взаимодействующей жидкости. Обратный предел (так называемый унитарный), когда  $a \rightarrow \infty$ , как мы помним из теории рассеяния, отвечает порогу образования двухчастичного связанного состояния. Такие очень слабо связанные состояния, димеры, действительно существуют в реальном жидком гелии.

Понятие звуковых волн имеет ясный смысл только для длин волн, больше расстояния между частицами, когда можно говорить о когерентных многочастичных возбуждениях. В этой системе коллективный характер поддерживается присутствием конденсата.

Кванты звуковых волн, *фононы*, определяют все низкотемпературные статистические свойства. Фононный спектр при малых волновых векторах был предложен *Ландау (1941)* для объяснения термодинамики жидкого  ${}^4\text{He}$ . При  $p \simeq p_c$  эмпирический спектр меняет характер (так называемый *ротонный минимум*, см. рис. 15.2), что может объясняться либо заметным изменением эффективных Фурье-компонент взаимодействия (достаточно предположить, что Фурье-компоненты взаимодействия ведут себя как  $U_{\mathbf{p}} \approx U_0 - \text{const} \cdot |\mathbf{p}|$ ), либо другой природой возбуждений (этот вопрос до сих пор обсуждается). При достаточно больших импульсах возбуждения фононного типа становятся нестабильными относительно распада на рото-

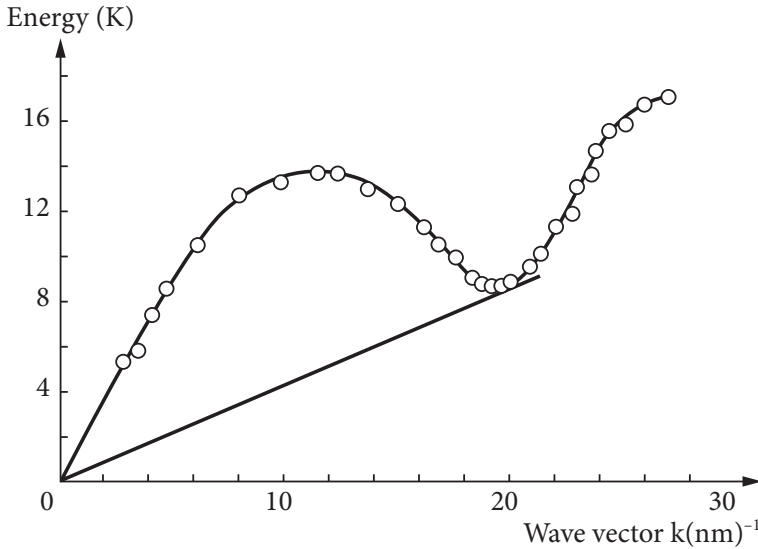


Рис. 15.2. Эмпирический спектр возбуждений [87] жидкого  ${}^4\text{He}$ ; наклон тонкой линии показывает критическую скорость по критерию Ландау (15.43)

ны [88]. В общем, следует помнить, что жидкий гелий — не газ, тогда как наши соображения ограничены случаем слабо взаимодействующего газа.

Фононный спектр можно рассматривать как ещё один пример *голдстоуновской моды*, вспомните гл. 14. Здесь труднее увидеть, на каком этапе наше приближённое решение вводит спонтанное нарушение симметрии. Это происходит, когда мы подставляем вместо конденсатных операторов  $\hat{a}_0$  и  $\hat{a}_0^\dagger$  число  $\sqrt{N_0}$ , уравнение (15.10). Вместо этого можно положить

$$\hat{a}_0 \Rightarrow \sqrt{N_0}e^{i\alpha}, \quad \hat{a}_0^\dagger \Rightarrow \sqrt{N_0}e^{-i\alpha} \quad (15.37)$$

с произвольным действительным  $\alpha$ . Это фазовое преобразование конденсата сохраняет коммутационные соотношения и ведёт к другому, но совершенно эквивалентному основному состоянию. Поэтому среди возможных коллективных возбуждений имеется *глобальное* (во всём пространстве) изменение фазы конденсата без изменения энергии, которое является длинноволновым пределом реальной фононной ветви.

И это действительно так. Для бесконечно малого фазового преобразования мы имеем из (15.37)

$$\delta a_0 = i\alpha\sqrt{N_0}, \quad \delta a_0^\dagger = -i\alpha\sqrt{N_0}. \quad (15.38)$$

Это значит, что в голдстоуновской моде

$$\frac{\delta a_0}{\delta a_0^\dagger} = -1. \quad (15.39)$$

В фононной моде мы имеем из (15.30) или (15.31)

$$\frac{\langle 0|A_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle}{\langle 0|A_{-\mathbf{p}}^\dagger|\mathbf{p}\rangle} = \frac{n_0 U_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}} - [\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]}. \quad (15.40)$$

При значениях энергии возбуждения (15.33) и химического потенциала (15.23) в пределе  $p \rightarrow 0$  правая часть стремится к  $-1$ , в согласии с (15.39). Таким образом, присутствие фононной ветви с нулевой энергией в длинноволновом пределе восстанавливает инвариантность относительно фазовых преобразований конденсата (*калибровочную симметрию*). Эта симметрия была нарушена специфическим выбором фазы конденсата.

## 15.5. Сверхтекучесть

Как было установлено в знаменитых экспериментах *Капицы и Аллена и Мизенера, 1940*, жидкий  $^4\text{He}$  является *сверхтекучим* при температурах ниже 2,2 К. Эта жидкость протекает без вязкости через капилляры и щели, непроницаемые даже для газов.

Сверхтекучесть — одно из замечательных макроскопических квантовых явлений. Его понимание основывается на свойствах энергетического спектра элементарных возбуждений системы. Необходимое условие сверхтекучести было сформулировано Ландау (1941). На микроскопическом уровне трение и диссипация энергии в движущейся среде происходит через рождение элементарных возбуждений, которые поглощают энергию глобального движения. Но требуемые передачи энергии и импульса должны быть взаимно согласованы, а это зависит от спектра возбуждений системы. Возьмём простейший случай однородно движущейся квантовой жидкости в лабораторной системе. Это движение ограничено стенками сосуда. Взаимодействие между стенками и системой имеет характер трения, если рождение возбуждений (реальных, а не виртуальных) в жидкости за счёт кинетической энергии разрешено законами сохранения. Тот же результат получится, если движущаяся жидкость обтекает макроскопическое препятствие.

Удобно рассматривать систему отсчёта, в которой жидкость покоится, тогда как стенки или макроскопические тела движутся относительно неё

со скоростью  $\mathbf{u}$ . Движущийся объект имеет макроскопическую энергию  $E$  и импульс  $\mathbf{P}$ . В элементарном акте взаимодействия стенки или препятствие потеряют энергию  $\Delta E$  и импульс  $\Delta \mathbf{P}$ . В нашей системе с дискретным квантовым спектром этот процесс создаст элементарное возбуждение с импульсом  $\mathbf{p}$  и энергией  $\varepsilon(\mathbf{p})$ . В соответствии с законами сохранения,

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta E, \quad \mathbf{p} = \mathbf{P}. \quad (15.41)$$

Поскольку для макроскопического объекта  $\Delta E = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{P})$ , необходимое условие для обмена энергией–импульсом есть

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{p}). \quad (15.42)$$

Условие (15.42) определяет угол между импульсом новорожденного возбуждения и относительной скоростью. Но оно может быть выполнено только если  $\varepsilon(\mathbf{p}) < up$ , т.е. не при всяком спектре возбуждений. Должно выполняться очевидное ограничение, что относительная скорость  $u$  должна превышать *критическую скорость*  $u_c$  (см. рис. 15.2):

$$u > u_c, \quad u_c = \min \left( \frac{\varepsilon(p)}{p} \right). \quad (15.43)$$

Если этот *критерий Ландау* выполнен, то относительное движение будет затухать. При скоростях меньше критического значения обмен энергией и импульсом, связанный с рождением элементарного возбуждения, запрещён. Тогда система является *сверхтекучей*.

В идеальном (невзаимодействующем) Бозе-газе в основном состоянии все частицы находятся в конденсате. Элементарное возбуждение, создаваемое оператором  $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_0$ , переводит частицу из конденсата в состояние  $\mathbf{p} \neq 0$  и требует энергию  $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$ . В соответствии с (15.43) критическая скорость равна нулю. Это значит, что коллективное движение такого газа как целого невозможно — сколь угодно слабое взаимодействие со стенками будет возбуждать отдельные частицы из конденсата, разрушая макроскопическое движение.

Ситуация меняется в неидеальном Бозе-газе. Даже слабое взаимодействие между частицами радикально меняет спектр, потому что идеальный Бозе-газ неустойчив из-за макроскопического усиления матричных элементов, связанных с конденсатом. Фононный спектр (15.35) удовлетворяет критерию Ландау (15.43) с критической скоростью, равной скорости звука,  $u_c = c$ . Для течения с меньшей скоростью мы можем ожидать сверхтекуче-

сти. Из-за ротоного минимума в эмпирическом спектре гелия (рис. 15.2) критическая скорость меньше  $c$ : легче родить элементарное возбуждение, соответствующее этому минимуму. В действительности критическая скорость ещё меньше; вероятно, она определяется рождением маленьких вихревых колец.

## 15.6. Канонические преобразования

Вернёмся к выводу фононного спектра в Бозе-газе. Как мы обсуждали, операторы  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  и  $\hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger$  дают альтернативные пути связи основного состояния и возбуждённого состояния с одним элементарным возбуждением фононного типа. Пока число таких возбуждений много меньше  $N_0$ , они независимы и могут рассматриваться как новые *квазичастицы*, подчиняющиеся статистике Бозе.

Это можно формализовать, введя квазичастичные операторы для  $p \neq 0$  как линейные комбинации операторов  $\hat{A}_{\mathbf{p}}$  и их эрмитово сопряжённых, совпадающие с исходными операторами  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  и их сопряжёнными при  $t = 0$ , уравнение (15.26),

$$\hat{b}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}}\hat{A}_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}\hat{A}_{-\mathbf{p}}^\dagger, \quad (15.44)$$

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger = u_{\mathbf{p}}^*\hat{A}_{\mathbf{p}}^\dagger + v_{\mathbf{p}}^*\hat{A}_{-\mathbf{p}}, \quad (15.45)$$

Это *преобразование Боголюбова* [89] приводит к новым бозонам, если сохраняются коммутационные соотношения

$$[\hat{b}_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \quad \rightsquigarrow \quad |u_{\mathbf{p}}|^2 - |v_{\mathbf{p}}|^2 = 1; \quad (15.46)$$

в изотропной среде коэффициенты преобразования не зависят от направления импульса  $u_{\mathbf{p}} = u_p$ ,  $v_{\mathbf{p}} = v_p$ . Все операторы  $b$  автоматически коммутируют, так же, как и операторы  $b^\dagger$ . Таким образом, мы имеем *каноническое преобразование* от старых бозонных операторов к новым; детерминант преобразования равен 1.

Линейное преобразование (15.44–15.45) при условии (15.46) можно обратить:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = u_p^*\hat{b}_{\mathbf{p}} - v_p\hat{b}_{-\mathbf{p}}^\dagger, \quad \hat{A}_{\mathbf{p}}^\dagger = u_p\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger - v_p^*\hat{b}_{-\mathbf{p}}, \quad (15.47)$$

Этот формализм близок к тому, что мы использовали в разд. I.12.8 для сжатых состояний гармонического осциллятора в присутствии источника, который рождает кванты парами. Здесь, как видно на рис. 15.1, роль такого источника играет конденсат. Пары, рождённые при столкновении двух ча-

стиц конденсата, состоят из двух различных бозонов  $\mathbf{p}$  и  $-\mathbf{p}$ , сопряжённых друг другу в смысле обращения времени.

### Задача 15.2

Найдите оператор, соответствующий нормальной моде,  $b_{\mathbf{p}}(t) \propto e^{-i\omega t}$ , покажите, что  $\hbar\omega = E_p$ , уравнение (15.32), и найдите коэффициенты канонического преобразования.

### Решение.

Соотношение между коэффициентами имеет вид

$$\frac{v_p}{u_p} = \frac{\varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p) - E_p}{n_0 U_p} = \frac{n_0 U_p}{E_p + \varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p)}. \quad (15.48)$$

С условием нормировки (15.46) мы получаем

$$u_p^2 = \frac{\varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p) + E_p}{2E_p}, \quad v_p^2 = \frac{\varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p) - E_p}{2E_p}. \quad (15.49)$$

Взяв длинноволновый предел и используя явные выражения для спектра (15.32,15.33), мы видим, что при  $p \ll mc$  амплитуды  $u_p$  и  $v_p$  возрастают до одного и того же значения (их разность (15.46) мала по сравнению с каждым из них):

$$u_p^2 \approx v_p^2 \approx \frac{mc}{2p}, \quad 0 < p \ll mc. \quad (15.50)$$

Этот результат показывает, что отношение (15.40), которое равно  $-v_p/u_p$  в соответствии с (15.47), действительно стремится к  $-1$  в пределе  $p \ll mc$ , как и должно быть для голдстоуновской моды, см. уравнение (15.39).

### Задача 15.3

Выведите все результаты альтернативным путём в формулировке, не зависящей от времени: введите неизвестный химический потенциал  $\mu$  так, что  $\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$ ; проведите каноническое преобразование и выразите полный гамильтониан через новые операторы  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  и  $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger$ ; выделите члены с четырьмя, двумя и одним конденсатным оператором; замените конденсатные операторы на  $c$ -число  $\sqrt{N_0}$ ; тогда члены с двумя конденсатными операторами дают квадратичную форму относительно операторов с  $\mathbf{p} \neq 0$ ; эта форма диагонализуется как в разд. I.12.7 выбором амплитуд  $u$ ,  $v$ ; коэффициент при диагональном члене  $b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}}$  определяет энергию элементарного

возбуждения, которая совпадает с (15.32) после правильного выбора химического потенциала (15.20), гарантирующего отсутствие *энергетической щели* в спектре элементарных возбуждений,  $E_{\mathbf{p}} \rightarrow 0$  при  $p \rightarrow 0$ .

Поскольку амплитуды нормальных мод  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  и  $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger$  являются Бозе-операторами с определённой частотой, основное состояние системы в этом приближении является вакуумным состоянием  $|\Psi_0\rangle$  относительно этих квантов. Операторы  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  обращают в нуль вакуумное состояние

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}|\Psi_0\rangle = 0, \quad \mathbf{p} \neq 0, \quad (15.51)$$

тогда как операторы рождения создают кванты нормальных мод

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger|\Psi_0\rangle = |\mathbf{p}\rangle. \quad (15.52)$$

Теперь мы находим плотность надконденсатных частиц (15.17)

$$n_{\mathbf{p}} = \langle \Psi_0 | \hat{A}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle. \quad (15.53)$$

С помощью канонического преобразования (15.47) и вакуумных правил (15.51) мы получаем

$$n_{\mathbf{p}} = v_p^2 \approx \frac{mc}{2p}, \quad (15.54)$$

где последнее выражение верно при  $p \ll mc$ . Уравнение (15.54) даёт хвост макроскопической плотности конденсата при малых, но ненулевых импульсах.

#### Задача 15.4

Найдите числа заполнения при больших импульсах  $p \gg mc$ .

**Решение.**

$$n_{\mathbf{p}} \approx \left( \frac{mc}{p} \right)^4, \quad p \gg mc. \quad (15.55)$$

Поскольку при  $p \gg mc$  числа заполнения быстро падают, мы можем оценить полную плотность надконденсатных частиц как

$$n_{p>0} \approx \int_{p < mc} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{mc}{2p} = \frac{1}{8\pi^2} \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^3. \quad (15.56)$$

Весь этот подход работает, если большинство частиц всё ещё находятся в конденсате. Уравнения (15.56) и (15.35) показывают, что

$$\frac{n_{p>0}}{n_0} = \frac{1}{8\pi^2 n_0} \left( \frac{m n_0 U_0}{\hbar^2} \right)^{3/2} = \sqrt{\frac{n_0 a^3}{\pi}}, \quad (15.57)$$

где  $a$  — длина рассеяния (15.6). Мы видим, что малым параметром приближения слабо неидеального Бозе-газа является  $\sqrt{n_0 a^3} \sim (a/r_0)^{3/2}$ .

### Задача 15.5

Найдите аномальное среднее значение (15.18).

**Решение.**

$$\Delta_p = -u_p v_p = -\frac{\mu}{2E_p}. \quad (15.58)$$

В длинноволновом пределе  $\Delta_p \approx (-mc/2p)$ .

## 15.7. Фононы как волны плотности

Дополнительный взгляд на ситуацию даётся описанием в терминах координатных переменных.

Оператор рождения элементарного возбуждения (15.45) в длинноволновом пределе (15.50), когда  $u_p$  и  $v_p$  приближённо равны, имеет вид

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \approx u_p (\hat{A}_{\mathbf{p}}^\dagger + \hat{A}_{-\mathbf{p}}). \quad (15.59)$$

Сопоставим это с оператором флуктуаций плотности (11.41). В многочастичном представлении этот оператор использовался для вывода правила сумм (разд. I.7.9). В импульсном представлении вторичного квантования мы имеем вместо (I.7.145) выражение (14.89) для бесспиновых бозонов

$$\hat{\rho}_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'}. \quad (15.60)$$

В области малых импульсов слабо неидеального Бозе-газа операторы с  $\mathbf{p} = 0$  соответствуют макроскопическим числам заполнения, и их можно заменить на  $\sqrt{N_0}$ . Тогда флуктуация плотности связана с возбуждением частиц из конденсата, и после этой подстановки уравнение (15.60) сводится к

$$\hat{\rho}_{\mathbf{p}} \Rightarrow \sqrt{N_0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger). \quad (15.61)$$

Здесь два члена происходят от  $\mathbf{p}' = 0$  и  $\mathbf{p}' = -\mathbf{p}$  в сумме (15.60) соответственно. Поэтому элементарное возбуждение Бозе-газа, создаваемое оператором (15.59), является в фононной длинноволновой области ничем иным, как флуктуацией плотности, распространяющейся как волна с определённым импульсом. Это позволяет интерпретировать очевидным образом голдстоуновскую моду. В пределе  $p \rightarrow 0$  фаза флуктуации плотности везде одинакова и эквивалентна глобальному преобразованию (15.37); постоянная фаза не требует энергии.

Если оператор  $\hat{\rho}_{\mathbf{p}}$  имеет большой матричный элемент между основным состоянием и возбуждённым состоянием  $|\mathbf{p}\rangle$ , то мы предполагаем, что один этот переход *насыщает* правило сумм (I.7.146), которое в явном виде (I.7.130) записывается как

$$\sum_n (E_n - E_0) \left| \langle \Psi_n(\mathbf{p}) | \hat{\rho}_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2 = \frac{p^2}{2m} N, \quad (15.62)$$

где мы суммируем по всем промежуточным состояниям  $|\Psi_n(\mathbf{p})\rangle$ , имеющим импульс  $\mathbf{p}$ . Насыщение означает, что единственное состояние  $|\mathbf{p}\rangle$  с энергией возбуждения  $E_{\mathbf{p}}$  даёт значительный вклад в правило сумм, т. е.

$$E_{\mathbf{p}} |\langle \mathbf{p} | \hat{\rho}_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle|^2 \approx \frac{p^2}{2m} N. \quad (15.63)$$

Величина

$$S_{\mathbf{p}} = \langle \Psi_0 | \hat{\rho}_{\mathbf{p}} \hat{\rho}_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \quad (15.64)$$

называется *статическим формфактором*. Она выражает корреляционную функцию флуктуаций плотности. Подставляя в уравнение (15.64) полный набор возбуждённых состояний с импульсом  $\mathbf{p}$  и опять предполагая насыщение, мы получаем

$$S_{\mathbf{p}} = \sum_n \left| (\rho_{\mathbf{p}}^\dagger)_{n0} \right|^2 \approx |\langle \mathbf{p} | \hat{\rho}_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle|^2. \quad (15.65)$$

Теперь результат (15.63) может быть переписан в виде, предложенном Р. Фейнманом:

$$E_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m} \frac{N}{S_{\mathbf{p}}}. \quad (15.66)$$

Статический формфактор (15.64) — это функция, прямо связанная с экспериментально наблюдаемыми величинами, особенно с *парной корреля-*

корреляционной функцией, которая определяется как

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{N(N-1)} \left\langle \sum_{ab(a \neq b)} \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \right\rangle, \quad (15.67)$$

вероятность найти две частицы на расстоянии  $\mathbf{r}$  друг от друга. Среднее значение в (15.67) берётся либо по основному состоянию  $|\Psi_0\rangle$ , либо по соответствующему тепловому ансамблю при ненулевой температуре. Статический формфактор есть по существу Фурье-образ корреляционной функции:

$$S_{\mathbf{p}} = \left\langle \sum_{ab} e^{(i/\hbar)\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \right\rangle = \int d^3r e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \left\langle \sum_{ab} \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \right\rangle. \quad (15.68)$$

Таким образом,

$$S_{\mathbf{p}} = N + N(N-1) \int d^3r e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} g(\mathbf{r}). \quad (15.69)$$

Здесь член  $N$  происходит от корреляции с самим собой,  $a = b$ .

## 15.8. Приближение локальной плотности

Существуют физические аргументы, позволяющие связать уравнение (15.66) со скоростью звука и, следовательно, с нашим предыдущим результатом (15.35) для спектра элементарных возбуждений в длинноволновом пределе. Применим к системе слабое статическое возмущение плотности, меняющееся в пространстве с волновым вектором  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ ,

$$\hat{H}' = \lambda \int d^3r \hat{\rho}(\mathbf{r}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (15.70)$$

или, в терминах операторов флуктуаций плотности (помечаемых здесь волновым вектором  $\mathbf{k}$ ):

$$\hat{H}' = \frac{\lambda}{2} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}} + \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger). \quad (15.71)$$

Мы предполагаем, что система *стабильна* по отношению к таким слабым ( $\lambda \rightarrow 0$ ) возмущениям. Однородное основное состояние получит модуляцию

плотности, и его энергия во втором порядке теории возмущений сводится к

$$E - E_0 = \sum_n \frac{|H'_{n0}|^2}{E_0 - E_n} = -\frac{\lambda^2}{2} \sum_n \frac{|(\rho_{\mathbf{k}}^\dagger)_{n0}|^2}{E_n - E_0} \equiv -\frac{\lambda^2}{2} X_{\mathbf{k}}. \quad (15.72)$$

### Задача 15.6

Найдите среднее значение операторов флуктуаций плотности и возмущения  $H'$  в возмущённом основном состоянии  $|\Psi'_0\rangle$ .

**Решение.**

$$\langle \Psi'_0 | \hat{\rho}_{\mathbf{k}} | \Psi'_0 \rangle = -\lambda X_{\mathbf{k}}; \quad (15.73)$$

$$\langle \Psi'_0 | \hat{H}' | \Psi'_0 \rangle = -\frac{\lambda^2}{2} 2 X_{\mathbf{k}} = -\lambda^2 X_{\mathbf{k}}. \quad (15.74)$$

Теперь вычислим изменение энергии другим путём, с помощью *макроскопических* аргументов. Полная энергия возмущённого состояния равна

$$E = \langle \Psi'_0 | \hat{H} + \hat{H}' | \Psi'_0 \rangle. \quad (15.75)$$

Чтобы найти среднее значение исходного гамильтониана  $H$  в новом состоянии, мы используем, подобно идее функционала плотности (разд. 13.10), *приближение локальной плотности*. А именно, если невозмущённая энергия может быть записана как  $E_0 = V\varepsilon(n)$ , то при *больших длинах волн* возмущения, когда  $kr_0 \ll 1$ , большие части системы чувствуют просто плавное изменение локальной плотности, тогда как её градиенты всё ещё достаточно малы. Поэтому мы ожидаем, что *локально* внутренняя энергия системы всё ещё может быть описана тем же функционалом  $\varepsilon(n)$  с плавно меняющейся плотностью  $n(\mathbf{r})$ :

$$\langle \Psi'_0 | \hat{H} | \Psi'_0 \rangle = \int d^3r \varepsilon(n(\mathbf{r})). \quad (15.76)$$

При малых изменениях плотности  $n \rightarrow n + \Delta n(\mathbf{r})$  мы можем использовать разложение

$$\varepsilon(n(\mathbf{r})) \approx \varepsilon(n) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} \Delta n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} (\Delta n)^2 + \dots \quad (15.77)$$

Модуляция плотности возмущением (15.70) может быть найдена из (15.73):

$$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = n + \Delta n(\mathbf{r}) = n + \frac{1}{V} \langle \rho_{\mathbf{k}} \rangle 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (15.78)$$

что может быть выражено через ту же сумму  $X_{\mathbf{k}}$ , которая была определена в уравнении (15.72)

$$\Delta n(\mathbf{r}) = -2 \frac{\lambda}{V} X_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (15.79)$$

Член первого порядка в разложении (15.77) обращается в нуль после интегрирования осциллирующего косинуса, интеграл по объёму от  $\cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  во втором члене даёт  $V/2$ , и у нас остаётся

$$\langle \Psi'_0 | \hat{H} | \Psi'_0 \rangle = E_0 + \frac{1}{2} \left( 2 \frac{\lambda}{V} X \right)^2 \frac{V}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} = E_0 + \lambda^2 \frac{X^2}{V} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2}, \quad (15.80)$$

где  $X$  — та же величина  $X_{\mathbf{k}}$ , взятая в длинноволновом пределе  $k \rightarrow 0$ . Собирая все члены порядка  $\lambda^2$  в (15.72, 15.74, 15.75) и (15.80), мы приходим к

$$-\frac{\lambda^2}{2} X = -\lambda^2 X \left( 1 - \frac{X}{V} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} \right), \quad (15.81)$$

или

$$X = \frac{V}{2} \left( \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} \right)^{-1} = \frac{N}{2n} \left( \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} \right)^{-1}. \quad (15.82)$$

Теперь мы можем связать величину  $X$ , уравнения (15.72) и (15.82), со скоростью звука. Давление  $P$  в невозмущённой среде равно

$$P = - \left( \frac{\partial E_0}{\partial V} \right)_N, \quad (15.83)$$

но производная по объёму при фиксированном  $N$  может быть выражена как

$$\left( \frac{\partial}{\partial V} \right)_N = -\frac{n}{V} \left( \frac{\partial}{\partial n} \right)_N, \quad (15.84)$$

так что, с  $E_0 = V\varepsilon(n)$ ,

$$P = n \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} - \varepsilon. \quad (15.85)$$

Как следует из равновесной гидродинамики [90], скорость звука определяется производной давления по массовой плотности  $mn$ :

$$c^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial n} = \frac{n}{m} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2}. \quad (15.86)$$

Уравнение (15.82) теперь говорит нам, что

$$X = \lim_{k \rightarrow 0} \sum_n \frac{|(\rho_{\mathbf{k}}^\dagger)_{n0}|^2}{E_n - E_0} = \frac{N}{2n} \frac{n}{2mc^2} = \frac{N}{2mc^2}. \quad (15.87)$$

Это соотношение называется *правилом сумм для обратной энергии*.<sup>1</sup>

Последний шаг в нашей цепочке аргументов состоит в том, что мы ожидаем, что в слабо неидеальном Бозе-газе правила сумм, такие как (15.87), в длинноволновом пределе насыщаются единственной голдстоуновской ветвью спектра элементарных возбуждений  $E_{\mathbf{p}}$ ,  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ . Тогда уравнение (15.87) определяет физическую нормировку матричного элемента флуктуации плотности

$$S_{\mathbf{k}} \approx \left| \langle \mathbf{k} | \rho_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2 = E_{\mathbf{p}} X = E_{\mathbf{p}} \frac{N}{2mc^2}. \quad (15.88)$$

Вместе с правилом сумм (15.66) это даёт универсальный фононный спектр

$$E_{\mathbf{p}}^2 = c^2 p^2 \quad (15.89)$$

с макроскопически определённой скоростью звука. Поскольку при нулевой температуре  $\mu = \partial P / \partial n$ , это определение совпадает с определением через химический потенциал, использованным в микроскопических рассуждениях, см. уравнения (15.20) и (15.38).

## 15.9. Неоднородный газ

До сих пор мы обсуждали основное состояние и элементарные возбуждения в пространственно-однородном случае. Тогда возбуждения характеризуются своим импульсом  $\mathbf{p}$ . Во многих случаях Бозе-система имеет *пространственно-неоднородную* конфигурацию. Все недавние успехи в получении Бозе-конденсации [91] связаны со специальными ловушками, где могут охлаждаться атомы. Ловушку можно описать потенциалом  $U^\circ(\mathbf{r})$ , обычно близким к потенциалу гармонического осциллятора, возможно анизотропного. Тогда гамильтониан газа содержит кинетическую энергию, взаимодействие между частицами через потенциал  $U(\mathbf{r})$  и внешний

<sup>1</sup>В русскоязычной литературе это правило сумм для сжимаемости — *Прим. редактора перевода.*

потенциал  $U^\circ(\mathbf{r})$ . Во вторично-квантованном виде (42.67)

$$\hat{H} = \hat{K} + \int d^3r \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger U^\circ(\mathbf{r}) \hat{a}_\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}'}^\dagger U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{a}_{\mathbf{r}'} \hat{a}_\mathbf{r}. \quad (15.90)$$

Гейзенберговские уравнения движения для операторов уничтожения имеют вид

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{a}}_\mathbf{r} &= [\hat{a}_\mathbf{r}, \hat{H}] = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{a}_\mathbf{r} + U^\circ(\mathbf{r}) \hat{a}_\mathbf{r} + \int d^3r' d^3r \hat{a}_{\mathbf{r}'}^\dagger U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{a}_{\mathbf{r}'} \hat{a}_\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (15.91)$$

Поскольку нас интересует макроскопически когерентное движение, мы применим аргументы и формализм главы I.14 и заменим матричные элементы операторов  $\hat{a}_\mathbf{r}$  и  $\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger$  на макроскопическую волновую функцию  $\Psi(\mathbf{r})$ , представляющую конденсат и в общем случае пространственно неоднородную:

$$i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) + \int d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}). \quad (15.92)$$

Функция  $\Psi(\mathbf{r})$  удовлетворяет *нелинейному* уравнению типа Шрёдингера. Нелинейность соответствует самосогласованному среднему полю, создаваемому взаимодействующими частицами.

Теорию можно далее упростить для газа низкой плотности с отталкивающим взаимодействием, например, типа *твёрдых сфер*. Тут мы имеем парные взаимодействия при низких энергиях, так что существенно только  $s$ -волновое рассеяние. Такое двухчастичное взаимодействие полностью описывается длиной рассеяния  $a$ , уравнение (15.6), являющейся точным решением двухчастичной задачи. Тогда вместо истинного потенциала мы можем использовать в уравнениях движения *псевдопотенциал*

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Rightarrow g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a. \quad (15.93)$$

Это приводит уравнение (15.91) к *локальной* форме:

$$i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r})|^2 \Psi(\mathbf{r}). \quad (15.94)$$

Это *уравнение Питтаевского—Гросса* [92, 93] широко используется в физике Бозе-систем; его справедливость для чисто отталкивательного взаимодействия была строго доказана значительно позже [94]. В случае потенциалов типа Ван-дер-Ваальса (задача 2.6) применимость такой упрощённой формы

может быть сомнительна [95] из-за присутствия резонансов в рассеянии, обусловленных притягивательной частью.

Хотя соображения гл. 6 о макроскопически когерентном состоянии всё ещё применимы, *нелинейность* уравнения (15.94) привносит много разнообразных физических явлений, успешно изучаемых в атомных ловушках. Здесь мы приводим только пару примеров. В случае решений, не зависящих от времени, макроскопическая волновая функция эволюционирует со временем тривиальным образом, как обсуждалось в (I.14.10) и (I.14.12), в соответствии с

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-(i/\hbar)\mu t}, \quad |\psi(\mathbf{r})|^2 = n(\mathbf{r}), \quad (15.95)$$

где  $n(\mathbf{r})$  — распределение плотности. Стационарное уравнение имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + g|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}), \quad (15.96)$$

и интеграл от функции  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  нормирован на полное число частиц  $N$ . Нормировка фиксирована, потому что уравнение теперь нелинейно. Это уравнение определяет, подобно приближению Томаса–Ферми (разд. 13.5), равновесную плотность газа.

Пространственная конфигурация зависит от конкуренции характерных длин, корреляционного радиуса («длина залечивания»)  $\xi$ , определяемого взаимодействием, среднего расстояния между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3}$  и размера внешнего потенциала  $R$ . Для корреляционного радиуса мы получаем, приравнявая кинетический член  $\sim \hbar^2/(m\xi^2)$  и член взаимодействия  $gn$ , оценку  $\xi \sim \sqrt{\hbar^2/(mgn)}$ . Коллективные колебания, которые мы нашли выше, относятся к фононному типу, если длина волны больше  $\xi$ . Эта длина больше межчастичного расстояния на множитель

$$\frac{\xi}{r_0} \sim \xi n^{1/3} \sim \frac{\hbar}{\sqrt{mg} n^{1/6}} \sim (na^3)^{-1/6}, \quad (15.97)$$

где мы использовали длину рассеяния  $a$ . Из-за степени  $1/6$  это отношение не очень велико даже в разреженном газе, когда  $na^3 \sim (a/r_0)^{1/3} < 1$ . Если корреляционный радиус мал по сравнению с типичным размером внешнего потенциала, и мы не интересуемся поведением на таких малых расстояниях, то только внешний потенциал определяет макроскопическое распределение плотности

$$gn(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r}) = \text{const} = \mu \quad (15.98)$$

по аналогии с уравнением Томаса–Ферми (13.58).

Для основного состояния решение  $\psi$  может быть взято действительным, тогда как возможная координатная зависимость фазы соответствует присутствию токов, уравнение (I.14.15). Нелинейный член в уравнении (15.94) позволяет найти пространственную структуру *вихря*, где фаза квантуется (разд. I.14.6) в единицах кванта циркуляции (I.14.54). Считая вихревую линию направленной по оси  $z$ , а фазу равной  $\ell\alpha$ , где  $\alpha$  — азимутальный угол, а  $\ell$  — момент импульса на частицу (I.14.57), мы получаем уравнение Питаевского–Гросса (15.96) для радиальной части функции  $\psi(\mathbf{r}) = A(r) \exp(i\ell\alpha)$ , где  $A(r) = \sqrt{n(r)}$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dA}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell^2}{2mr^2} A(r) + gA^3(r) = \mu A(r). \quad (15.99)$$

Теперь мы видим, что радиус ядра вихря действительно определяется корреляционным радиусом, качественно введённым выше. Определим

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mgn_0}}, \quad (15.100)$$

где  $n_0$  — постоянная равновесная плотность. При  $\xi \ll R$  химический потенциал меняется в присутствии вихря незначительно, и мы всё ещё можем полагать  $\mu = gn_0$ . Тогда, вводя безразмерную радиальную координату  $y = r/\xi$  и относительную плотность  $f(y) = A(\xi y)/\sqrt{n_0}$ , мы можем переписать уравнение (15.99) в приведённой форме:

$$\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \left( y \frac{df}{dy} \right) + \left( 1 - \frac{\ell^2}{y^2} \right) f(y) - f^3(y) = 0. \quad (15.101)$$

На больших расстояниях от вихря  $y \gg l$  решение определяется нелинейностью и даёт  $f = f^3$ , что соответствует  $f \rightarrow 1$ , так что плотность равна невозмущённой  $n_0$ . Вблизи оси вихря мы оставляем производную и центробежный член; их совместное действие приводит к типичному поведению  $f \sim y^{|\ell|}$ . При  $\ell \neq 0$  решение обращается в нуль в ядре вихря (область без когерентного конденсата,  $n(r) \rightarrow 0$ ). Размер этого ядра порядка 1 в приведённых единицах, то есть  $r \sim \xi$ , корреляционный радиус. Поведение решения в промежуточной области может быть найдено численно. Во вращающейся ловушке вихри образуют решётку (разд. I.14.6), которая имитирует вращение твёрдого тела.

**Дополнительная литература:** [55], [68], [88], [96], [97, 98], [99]

Эксперимент не оставляет сомнения в том, что с той точностью, которую позволяют измерения, сопротивление исчезает. В то же время, однако, произошло нечто неожиданное. Исчезновение произошло не постепенно, а *внезапно*.

*Х. Камерлинг Оннес. Нобелевская лекция, 1913 г.*

## Глава 16

### Спаривание фермионов и сверхпроводимость

#### 16.1. Спаривание

Сверхпроводимость твёрдых тел, согласно теории *Бардина—Купера—Шриффера* (БКШ) [100, 101], является результатом притягивающих парных корреляций между электронами, которые преодолевают их кулоновское отталкивание. Притяжение возникает, как обсуждалось в разд. 14.8, от деформаций решётки. *Куперовские пары* образуют коллективное состояние, в некоторых отношениях подобное Бозе-конденсату, обладающее свойством сверхпроводимости (сверхтекучести заряженных частиц). С другими источниками притяжения аналогичные эффекты спаривания работают в других Ферми-системах, таких, как жидкий изотоп гелия  $^3\text{He}$ . Особые черты проявляются в *конечных* сверхтекучих системах, таких, как атомные ядра, фермионные атомы в ловушках или малые металлические зёрна. Физика нейтронных звёзд в значительной степени определяется сверхтекучестью нейтронов или других составляющих, включая кварки.

Пусть фермионы движутся в среднем поле, индивидуальные одночастичные состояния в котором будут обозначаться  $|\lambda\rangle$ . Мы предполагаем, что система инвариантна относительно обращения времени, и наиболее сильное притяжение действует между частицами на  *$T$ -сопряжённых* орбитах (разд. II.5.6). Так обстоит дело для сверхпроводящих металлов и атомных ядер. Этот тип спаривания благоприятен для сил притяжения благодаря максимальному перекрытию между спариваемыми орбиталями. Такая пара инвариантна относительно обращения времени; в пространственно-однородной системе она должна иметь нулевой полный импульс  $\mathbf{P}$  (квазиимпульс в периодической решётке), а также нулевой полный спин  $S = 0$ , в сферических ядрах со спин-орбитальной связью пара имеет нулевой полный момент

импульса  $\mathbf{J}$ . Известны и более сложные типы спаривания, например в жидком  ${}^3\text{He}$  [102, 103].

Спаривание в конечной вырожденной системе даёт поучительный пример решаемой задачи многих тел [104]. Волновая функция пары с  $J = 0$  была построена в задаче II.7.5 для одной сферической  $j$ -оболочки, где  $\mathcal{T}$ -сопряжённая орбита определяется соответствующей фазой (II.5.68). Удобно ввести специальное обозначение, не предполагающее сферической симметрии, а основанное исключительно на инвариантности относительно обращения времени. Для каждого одночастичного состояния  $|\lambda\rangle$   $\mathcal{T}$ -сопряжённое состояние будет обозначаться  $|\tilde{\lambda}\rangle$ ; например, в однородной системе состояние с тильдой соответствует противоположному импульсу и проекции спина. С нашим выбором фаз в сферическом базисе одночастичное обращение времени в произвольном базисе может быть определено через разложение по полному набору сферических состояний:

$$|\lambda\rangle = \sum_{jm} A_{jm}^\lambda |jm\rangle \Rightarrow |\tilde{\lambda}\rangle = \sum_{jm} (A_{jm}^\lambda)^* (-)^{j-m} |j-m\rangle. \quad (16.1)$$

Важно, как упоминалось в разд. II.5.6, чтобы двукратное обращение времени воспроизводило исходное фермионное состояние с *противоположным знаком*,

$$|\tilde{\tilde{\lambda}}\rangle = \sum_{jm} A_{jm}^\lambda (-)^{j-m} (-)^{j+m} |jm\rangle = \sum_{jm} A_{jm}^\lambda (-)^{2j} |jm\rangle = -|\lambda\rangle. \quad (16.2)$$

Это следствие статистики Ферми (полуцелые значения  $j$ ).

В общем случае двухфермионное спаренное состояние может быть получено из вакуума действием *оператора пары*

$$\hat{P}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} C_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger}, \quad (16.3)$$

где определение одночастичного оператора  $\hat{a}_{\lambda}^{\dagger}$  для  $\mathcal{T}$ -сопряжённой орбиты включает все фазовые множители, так что  $\hat{C}_{\lambda} = C_{\tilde{\lambda}}$ , и

$$\hat{a}_{\tilde{\lambda}}^{\dagger} = -\hat{a}_{\lambda}^{\dagger}; \quad (16.4)$$

подобное равенство верно и для оператора уничтожения  $\hat{a}_{\lambda}$ .

Обычно эффекты спаривания играют важную роль только в относительно узком слое вблизи поверхности Ферми  $\Sigma_F$ . Это определено верно

для металлов и ядер, где выигрыш в энергии из-за спаривания мал по сравнению с энергией Ферми  $\varepsilon_F$ . (Ситуация может быть другой в сверхпроводниках с высокой температурой перехода в сверхпроводящее состояние; полная теория этого случая всё ещё отсутствует). Точный результат может быть получен в упрощённой модели, где в операторе пары (16.3)  $C_\lambda = 1$ , и все одночастичные состояния дают равные вклады. Это оправдано, если мы пренебрежём различиями кинетической энергии (или, в более общем случае, энергии в среднем поле) частиц в слое, положив  $\varepsilon_\lambda \equiv \varepsilon = \text{const}$ . В более реалистическом рассмотрении мы учтём изменение  $\varepsilon_\lambda$ , когда веса разных орбит в операторе пары становятся различными.

Сумма в  $\hat{P}^\dagger$  включает  $\Omega$  членов, где  $\Omega$  — вместимость слоя (чётное число состояний  $|\lambda\rangle$ ), соответствующее  $\Omega/2$   $\mathcal{T}$ -сопряжённым парам). Для одного  $j$ -уровня  $\Omega = 2j + 1$ . Члены, соответствующие  $\lambda$  и  $\bar{\lambda}$ , на самом деле равны друг другу, что следует из (16.4) и статистики Ферми (17.14). Поэтому можно убрать множитель  $1/2$  перед (16.3) и ограничить суммирование половиной одночастичных состояний, только  $\Omega/2$  «положительными» состояниями. Но проще использовать определение (16.4) с суммированием по всем доступным состояниям. Заметьте также, что оператор (16.3) отличается от  $\hat{P}_{L=\Lambda=0}^\dagger$ , использовавшегося в (17.81), постоянным множителем.

### Задача 16.1

Нормируйте состояние одной пары, получаемое как  $\hat{P}^\dagger|0\rangle$ .

#### Решение.

Введём эрмитово сопряжённый оператор уничтожения пары  $P$  и вычислим норму

$$\langle 0|\hat{P}\hat{P}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} \langle 0|\hat{a}_{\bar{\lambda}}\hat{a}_\lambda\hat{a}_{\bar{\lambda}'}^\dagger\hat{a}_{\lambda'}^\dagger|0\rangle. \quad (16.5)$$

Свёртывая операторы в матричном элементе, мы приходим к

$$\langle 0|\hat{P}\hat{P}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} (\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\bar{\lambda}\bar{\lambda}'} - \delta_{\lambda\bar{\lambda}'}\delta_{\bar{\lambda}\lambda'}), \quad (16.6)$$

где все фазовые множители включены в определение индексов с тильдой. Суммирование по  $\lambda'$  оставляет  $\delta_{\lambda\lambda} = 1$  в первом члене и, вследствие (16.2),  $\delta_{\lambda\bar{\lambda}} = -1$  во втором. В результате

$$\langle 0|\hat{P}\hat{P}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{2}\Omega, \quad (16.7)$$

что приводит к нормировке состояния одной пары

$$|1 \text{ пара}\rangle = \sqrt{\frac{2}{\Omega}} \hat{P}^\dagger |0\rangle. \quad (16.8)$$

По сравнению с (II.7.34) для случая одного  $j$ -уровня, нормировка содержит дополнительный множитель  $\sqrt{2}$  из-за статистики Ферми.

## 16.2. Пары и сеньорити

Теперь мы начинаем заполнять слой около  $\Sigma_F$  парами. Поскольку они имеют целый (нулевой) спин  $J$ , они являются *квазибозонами*, и мы можем создать их много. В то же время они не являются настоящими бозонами, и их сосуществование в одном пространстве искажается статистикой Ферми составляющих; мы кратко обсуждали статистику составных объектов в разд. 9.3. Повторное применение оператора  $\hat{P}^\dagger$  содержит перекрывающиеся члены с той же парой  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ , которые не работают из-за принципа запрета Паули. Несколько похожая ситуация была указана в связи с бозонным представлением Холстейна—Примакова операторов углового момента, задача II.1.8. Чтобы двигаться дальше, изучим более детально алгебру парных операторов.

### Задача 16.2

Покажите, что

$$[\hat{P}, P^\dagger] = \frac{\Omega}{2} - \hat{N}, \quad (16.9)$$

где

$$\hat{N} = \sum_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\lambda} \quad (16.10)$$

— оператор (11.12) полного числа частиц. Операторы  $\hat{N}$  и  $\hat{P}$ , действуя на вакуумное состояние, дают нуль.

Уравнение (16.9) помогает вычислить нормировку *состояния двух пар*, полученного повторным действием оператора рождения пары

$$\langle 0 | \hat{P}^2 (\hat{P}^\dagger)^2 | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{P} \left( [\hat{P}, \hat{P}^\dagger] + \hat{P}^\dagger \hat{P} \right) \hat{P}^\dagger | 0 \rangle. \quad (16.11)$$

Оператор  $\hat{N}$  в коммутаторе (16.9) действует в уравнении (16.11) на состояние с одной парой и даёт 2, остальные операторы сводятся к (16.7). Во втором члене в (16.11) мы опять образуем коммутатор и используем

$\hat{P}|0\rangle = 0$ . Собирая все члены, мы получаем

$$\langle 0|\hat{P}^2(\hat{P}^\dagger)^2|0\rangle = 2\frac{\Omega}{2}\left(\frac{\Omega}{2} - 1\right). \quad (16.12)$$

Почтительно обсудить смысл результата уравнения (16.12). Если вместимость пространства велика и число частиц относительно мало  $\Omega/2 \gg N$ , то, включая множитель  $\sqrt{\Omega/2}$  в определение  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$  и пренебрегая  $\hat{N}$  в (16.9), мы бы свели операторы пар к нормальным бозонам. В этом приближении коммутатор в уравнении (16.11) был бы равен  $2!(\Omega/2)^2$ . Разница между этим бозонным пределом и квазибозонным результатом (16.12) обусловлена эффектом *блокировки Паули*. У нас есть  $\Omega/2$  различных возможностей для первой пары  $(\lambda, \tilde{\lambda})$  и только  $\Omega/2 - 1$  для второй пары, поскольку две орбиты (одно состояние пары) уже заняты первой парой. Для большого  $\Omega/2$  различие невелико, и картина Бозе-конденсата пар качественно верна.

### Задача 16.3

Выведите общий результат для состояния  $N$  частиц, образованного  $n = N/2$  парами ( $N$  чётно):

$$\langle 0|\hat{P}^n(\hat{P}^\dagger)^n|0\rangle = \frac{n!(\Omega/2)!}{[(\Omega/2) - n]!}. \quad (16.13)$$

В уравнении (16.13) множитель  $n!$  — остаток Бозе-конденсата, а другие два факториала отражают блокировку, усиливающуюся, когда оболочка заполняется парами. Блокировка более заметна, если имеются *неспаренные частицы*, так что  $N$  больше  $2n$ , где  $n$  — число пар. Число неспаренных частиц

$$s = N - 2n \quad (16.14)$$

называется *сеньорити* (старшинство); эта схема классификации, широко используемая в атомной и ядерной физике, была введена Рака [104]. Состояние с  $N$  частицами и сеньорити  $s$  может обозначаться  $|N; s, \dots\rangle$ , где многоточие фиксирует орбиты неспаренных частиц. Например, в ядре с нечётным  $A$  одна орбита  $|\lambda\rangle$  заполнена валентной частицей. Присутствие неспаренной частицы блокирует состояние пары  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ , которое становится недоступным для пар. В нашей схеме трёхчастичное состояние с одной парой обозначается  $|3; s = 1_\lambda\rangle$ , где непарная орбита указана явно.

### Задача 16.4

Постройте нормированное состояние с одной парой и неспаренной частицей на орбите  $|\lambda\rangle$ .

**Решение.**

Нормировка находится из

$$\langle 0 | \hat{a}_\lambda \hat{P} \hat{P}^\dagger \hat{a}_\lambda^\dagger | 0 \rangle = \frac{\Omega}{2} - 1. \quad (16.15)$$

Здесь для вычисления мы опять используем коммутатор (16.9), где  $\hat{N}$  даёт 1 при применении к одночастичному состоянию. Простой смысл уравнения (16.15) — неспаренная частица удаляет одно парное состояние из доступного объёма.

**Задача 16.5**

Обобщите предыдущий результат на состояние с  $N$  частицами и  $n$  парами.

**Решение.**

Добавление каждой дополнительной пары действует таким же образом, как в (16.13), но доступный объём уменьшается на одно парное состояние,

$$\langle 0 | a_\lambda \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n a_\lambda^\dagger | 0 \rangle = \frac{n! [(\Omega/2) - 1]!}{[(\Omega/2) - 1 - n]!}. \quad (16.16)$$

Уравнение (16.16) определяет нормировку состояния  $|N = 2n + 1; s = 1_\lambda\rangle$ .

Тот же результат (16.16) верен, когда *обе* орбиты пары,  $\lambda$  и  $\tilde{\lambda}$ , заняты неспаренными частицами. Это состояние отличается от спаренного состояния (16.8), где пара равномерно распределена по доступному пространству, а не блокирует некоторую конкретную пару  $\mathcal{T}$ -сопряжённых орбит. Поскольку одно состояние пары уже заблокировано одиночной частицей, присутствие  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра не меняет ситуации. Поэтому, как в (16.16),

$$\langle 0 | \hat{a}_{\tilde{\lambda}} \hat{a}_\lambda \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\tilde{\lambda}}^\dagger | 0 \rangle = \frac{n! [(\Omega/2) - 1]!}{[(\Omega/2) - 1 - n]!}. \quad (16.17)$$

Наконец, две неспаренные частицы на орбитах  $\lambda$  и  $\lambda'$ , принадлежащих двум различным  $\mathcal{T}$ -сопряжённым парам, блокируют два парных состояния, приводя к

$$\langle 0 | \hat{a}_{\lambda'} \hat{a}_\lambda \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}^\dagger | 0 \rangle = \frac{n! [(\Omega/2) - 2]!}{[(\Omega/2) - 2 - n]!}. \quad (16.18)$$

Состояния с двумя неспаренными частицами — это  $|N = 2n + 2; s = 2_{\lambda, \lambda'}\rangle$ . Состояния с более высокими значениями сеньорити могут быть построены подобным образом. Заметьте, что на этом этапе мы не ввели

явно гамильтониан, так что схема сеньорити просто даёт базис, удобный для описания парных корреляций.

### 16.3. Мультипольные моменты в схеме сеньорити

В приложениях к атомной и ядерной физике практически интересно вычислить средние значения мультипольных моментов в чистых состояниях с сеньорити  $s = 1$  (одна неспаренная частица). Здесь мы рассмотрим состояние с одной валентной частицей на сферической орбите  $|j, m = j\rangle$ , как требуется определением (16.65) мультипольного момента, поскольку изотропные пары не дают вклада в момент импульса.

Мультипольные моменты относятся к классу одночастичных операторов, во вторично-квантованном виде выражаемых уравнениями (11.34, 37). Только диагональные члены в  $|jm\rangle$ -базисе дают вклад в средние значения, так что эффективные операторы могут быть записаны в виде

$$\hat{Q} = \sum_m (m|q|m) \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m. \quad (16.19)$$

Пусть чётный остаток состоит из  $n$  пар. Нам нужно вычислить матричный элемент

$$Q(n) = \langle N = 2n + 1; s = 1_j | \hat{Q} | N = 2n + 1; s = 1_j \rangle. \quad (16.20)$$

Удобно перейти к «дырочному» представлению, используя (16.19)  $\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m = 1 - a_m a_m^\dagger$ . Для любого мультипольного момента, кроме скалярных, замкнутая оболочка не даёт вклада, и след  $\sum_m (m|q|m) = 0$ . В матричном элементе (16.20) можно перенести оператор  $\hat{a}_m$  влево, а оператор  $\hat{a}_m^\dagger$  вправо, коммутируя их с  $\hat{P}^n$  и  $(\hat{P}^\dagger)^n$  соответственно (это делается бесплатно, поскольку  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$  содержат только пары Ферми-операторов). Включая норму (16.16) состояния с сеньорити 1, мы получаем

$$Q = - \sum_m (m|q|m) \frac{\langle 0 | \hat{a}_j \hat{a}_m \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_j^\dagger | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{a}_j \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_j^\dagger | 0 \rangle}. \quad (16.21)$$

Матричный элемент в числителе (16.21) обращается в нуль при  $m = j$  вследствие принципа Паули, и даётся формулами (16.17) и (16.18) для  $m = \tilde{j}$  и  $m \neq j, \tilde{j}$  соответственно. Подставляя отношение норм из уравнений (16.16–

16.18), мы получаем

$$Q = -(\tilde{j}|q|\tilde{j}) - \frac{(\Omega/2) - 1 - n}{(\Omega/2) - 1} \sum_{m \neq j, \tilde{j}} (m|q|m). \quad (16.22)$$

Вследствие обращения следа в нуль сумма в (16.22) равна  $-(j|q|j) - (\tilde{j}|q|\tilde{j})$ . Наконец,

$$Q = (j|q|j) - \frac{n}{(\Omega/2) - 1} [(j|q|j) + (\tilde{j}|q|\tilde{j})]. \quad (16.23)$$

Первый член — это нормальный одночастичный результат. Добавочный вклад, пропорциональный числу пар  $n$ , отражает их искажение из-за присутствия неспаренной частицы.

Окончательный результат зависит от характера мультипольного оператора. Для операторов, чётных относительно обращения времени, их средние значения по  $\mathcal{T}$ -сопряжённым состояниям равны, и ( $\Omega = 2j + 1$ )

$$Q = (j|q|j) \left( 1 - \frac{2n}{j - (1/2)} \right). \quad (16.24)$$

В начале оболочки ( $n = 0$ ) и в её конце ( $n = j - (1/2)$ ) уравнение (16.24) совпадает с простым результатом для одночастичного ( $Q = (j|q|j)$ ) и однодырочного ( $Q = -(j|q|j)$ ) состояний. Предсказывается, что чётные по времени мультипольные моменты как функции  $n$  линейно интерполируют между этими пределами. Их абсолютные величины меньше, чем на краях, и они меняют знак вблизи наполовину заполненной оболочки.

Для операторов, нечётных по времени,  $\mathcal{T}$ -сопряжённые орбиты имеют противоположные средние значения, и результат (16.23) совпадает с чисто одночастичным значением  $(j|q|j)$ . Это означает, например, что на магнитный момент ядра не влияет наличие пар, и для состояний с сеньорити  $s = 1$  он должен быть равен значению Шмидта, задача II.8.5. Конечно, все эти результаты основаны на многочастичной волновой функции, построенной только из пар и одной неспаренной частицы; другие динамические корреляции делают реальную ситуацию более сложной.

#### 16.4. Вырожденная модель и квазиспин

Здесь мы рассмотрим точно решаемую модель, которую, по-видимому, впервые изучил Рака. Она является первой разумной микроскопической моделью сверхпроводимости, хотя это не было понято в то время.

Предположим, что вблизи  $\Sigma_F$  частицы взаимодействуют только посредством сил притяжения спаривающего типа. Сила взаимодействия мала по сравнению с  $\varepsilon_F$  и даже с расстоянием между основными оболочками. Но она может быть порядка расщеплений между  $j$ -подоболочками. В грубом приближении мы считаем все одночастичные уровни в некотором интервале около поверхности Ферми вырожденными (имеющими энергию  $\varepsilon$ ). Полное число орбит в этом слое равно  $\Omega$ .

Спаривательное взаимодействие  $U_P$  ведёт к процессам рассеяния частиц на  $\mathcal{T}$ -сопряжённых орбитах  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ . В результате частицы либо остаются на той же паре орбит, либо переходят на другую пару  $(\lambda', \tilde{\lambda}')$ . Состояния с разорванными парами не дают достаточного перекрытия волновых функций, и мы просто предполагаем, что взаимодействие выключается, если орбиты частиц не являются  $\mathcal{T}$ -сопряжёнными друг другу.

Матричные элементы рассеяния, вызванные спаривающим взаимодействием,

$$U_{\lambda'\tilde{\lambda}}^P \equiv \langle \lambda', \tilde{\lambda}' | U_P | \lambda, \tilde{\lambda} \rangle, \quad (16.25)$$

мы заменяем на их среднее постоянное значение ( $G > 0$ )

$$\overline{U_{\lambda'\tilde{\lambda}}^P} = -G. \quad (16.26)$$

Из-за малости радиуса взаимодействия отдельные матричные элементы (16.25) малы — обратно пропорциональны объёму ядра. В самом деле, одночастичные волновые функции в подынтегральном выражении нормированы на полный объём, тогда как силы отличны от нуля только на малом расстоянии между частицами. Используя наш опыт с двухчастичными операторами во вторично-квантованном виде (11.71), мы постулируем, что гамильтониан вырожденной модели спаривания имеет вид

$$\hat{H} = \varepsilon \hat{N} - G \hat{P}^\dagger \hat{P}. \quad (16.27)$$

Произведение операторов рождения и уничтожения пар (16.3) содержит все вышеотмеченные процессы перехода пар.

Диагонализация гамильтониана (16.27) может быть произведена элегантным операторным методом. Без вычислений ясно, что операторы  $P$  и  $P^\dagger$  образуют лестничную структуру (разд. I.11.7), оператор  $\hat{N}$  меняется на  $\pm 2$  на каждом шаге по лестнице

$$[\hat{P}, \hat{N}] = 2\hat{P}, \quad [\hat{P}^\dagger, \hat{N}] = -2\hat{P}^\dagger. \quad (16.28)$$

Алгебра замыкается коммутатором (16.9). Три оператора —

$$\hat{\mathcal{L}}_- = \hat{P}, \quad \hat{\mathcal{L}}_+ = \hat{P}^\dagger, \quad \hat{\mathcal{L}}_z = \frac{1}{2} \left( \hat{N} - \frac{\Omega}{2} \right) - \quad (16.29)$$

образуют алгебру  $\mathcal{SU}(2)$ , изоморфную алгебре углового момента (II.1.25,26). «Момент»  $\mathcal{L}$  можно назвать *квазиспином*.

Проекция квазиспина  $\mathcal{L}_z$  определяется числом частиц и объёмом доступного одночастичного пространства. Поэтому  $\mathcal{L}_z$  — точный интеграл движения, принимающий одно и то же значение для всех состояний с данным  $N$ . По мере заполнения оболочки  $\mathcal{L}_z$  меняется от  $-(\Omega/4)$  для пустой оболочки ( $N = 0$ ) до  $+(\Omega/4)$  для полностью заполненной ( $N = \Omega$ );  $\mathcal{L}_z = 0$  для оболочки, заполненной наполовину ( $N = (\Omega/2)$ ). Другой интеграл движения — квадрат квазиспина

$$(\hat{\mathcal{L}})^2 = \hat{\mathcal{L}}_z^2 - \hat{\mathcal{L}}_z + \hat{P}^\dagger \hat{P}. \quad (16.30)$$

Он принимает значения  $\mathcal{L}(\mathcal{L} + 1)$ , где  $\mathcal{L}$  целое или полуцелое в зависимости от значения  $\mathcal{L}_z$ . При данном  $N$  различные состояния имеют различные значения  $\mathcal{L}$ , которые могут меняться от  $\mathcal{L}_{\min} = |\mathcal{L}_z|$  до максимального значения  $\mathcal{L}_{\max} = (\mathcal{L}_z)_{\max} = \Omega/4$ :

$$\frac{1}{2} \left| N - \frac{\Omega}{2} \right| \leq \mathcal{L} \leq \frac{\Omega}{4}. \quad (16.31)$$

Таким образом, каждое  $N$ -частичное состояние характеризуется квазиспиновыми квантовыми числами  $\mathcal{L}$  и  $\mathcal{L}_z$ . Среднее значение гамильтониана (16.27) определяет, в соответствии с (16.30), энергию состояния

$$E(\mathcal{L}, N) = \varepsilon N + \frac{G}{4} \left( N - \frac{\Omega}{2} - 2 \right) - G\mathcal{L}(\mathcal{L} + 1). \quad (16.32)$$

Предположим, например, что  $\Omega/4$  целое и число частиц  $N$  чётно. Тогда  $\mathcal{L}_z$  и  $\mathcal{L}$  целые, и основное состояние имеет максимальный квазиспин  $\mathcal{L} = \Omega/4$ .

Квантовое число сеньорити  $s$ , введённое в классификации состояний в разд. 16.2, — это удвоенное отклонение квазиспина  $\mathcal{L}$  от своего максимального значения

$$s = 2 \left( \frac{\Omega}{4} - \mathcal{L} \right). \quad (16.33)$$

Как следует из (16.31),  $s$  может меняться от 0 в основном состоянии до полного числа частиц  $N$  в случае оболочки, заполненной меньше, чем на

половину ( $N < \Omega/2$ ), или до числа дырок  $\Omega - N$ , если  $N > \Omega/2$ . При чётных  $N$  сеньорити тоже чётное. Энергетический спектр (16.32) как функция сеньорити принимает вид

$$E_s(N) = \varepsilon N + \frac{G}{4}(N - s)(N + s - \Omega - 2). \quad (16.34)$$

Из (16.34) видно, что квантовое число сеньорити описывает сокращение фазового пространства, доступного для взаимодействующих пар, вследствие блокировки  $s$  орбит  $s$  частицами (при  $N < \Omega/2$ ), не участвующими в парных корреляциях. По сравнению с основным состоянием с  $s = 0$  ненулевое значение  $s$  в (16.34) приводит к заменам  $N \rightarrow N - s$ ,  $\Omega \rightarrow \Omega - 2s$ , которые уменьшают число состояний, доступных для пар, и эффективно подавляют притяжение.

Энергия возбуждения состояний с фиксированным  $N$ , но ненулевым сеньорити, равна

$$E_s(N) - E_0(N) = \frac{G}{4}s(\Omega - s + 2). \quad (16.35)$$

Пока  $s \ll \Omega$ , энергия возбуждения (16.35) растёт как  $G\Omega s/4$ , т. е. пропорционально числу разорванных пар. Потеря связи для первого разрыва пары  $s = 2$

$$2\Delta = G\frac{\Omega}{2} \quad (16.36)$$

есть энергия связи пары. Она определяет *энергетическую щель* в спектре возбуждения пар, тесно связанную со сверхпроводящими свойствами. Эффект пропорционален объёму фазового пространства  $\Omega$  (потеря доступного пространства для всех пар). Коллективная природа связи обусловлена когерентной комбинацией всех доступных состояний в волновой функции пары, уравнения (16.3) и (16.8).

Добавим нечётную частицу к чётной системе  $N \rightarrow N + 1$ . Для нового (нечётного) числа частиц квазиспин  $\mathcal{L}$  полуцелый и  $s$  нечётно. Максимально возможное значение квазиспина равно  $\mathcal{L}_{\max} = (\Omega/4) - (1/2)$ , что соответствует  $s = 1$ , т. е. одной неспаренной частице, блокирующей одно состояние пары. Энергия основного состояния  $E_{s=1}(N + 1)$  нечётной системы следует из (16.34) при  $N \rightarrow N + 1$  и  $s = 1$ . Она может быть выражена через энергию основного состояния исходной чётной системы как

$$E_1(N + 1) = E_0(N) + \varepsilon + \frac{GN}{2}. \quad (16.37)$$

Потеря энергии опять имеет коллективный характер, будучи пропорциональна числу пар  $N/2$ ; каждая из пар потеряла одно состояние для возможного рассеяния.

Сравнение энергий основных состояний  $E_0(N)$  и  $E_0(N+2)$  двух соседних чётных систем показывает, что

$$E_0(N+2) - E_0(N) = 2\varepsilon + GN - G\frac{\Omega}{2}. \quad (16.38)$$

Это значит, что вследствие спаривания основное состояние нечётной системы сдвинуто вверх от средней энергии основных состояний её чётных соседей на половину величины щели (16.36):

$$E_1(N) = E_0(N) + \frac{E_0(N+2) - E_0(N)}{2} + G\frac{\Omega}{4} = \frac{E_0(N) + E_0(N+2)}{2} + \Delta. \quad (16.39)$$

Это объясняет чётно-нечётный эффект в формуле ядерных масс [10] как потерю энергии спаривания из-за блокировки Паули для нечётной системы.

## 16.5. Каноническое преобразование

Присутствие парных корреляций влияет на вероятности всех процессов в системе. Простейший пример — *передача пары*. В реакции между двумя ядрами пара нуклонов может передаваться от одного ядра к другому с сохранением корреляции между составляющими. Этот процесс, аналогичный эффекту Джозефсона в сверхпроводниках (разд. I.14.5), микроскопически может быть описан парой операторов  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$ . Добавляя или удаляя конденсатную пару, они не меняют сеньорити.

Алгебра квазиспина (16.29) позволяет использовать матричные элементы (II.1.49) углового момента для амплитуды передачи при одном и том же сеньорити:

$$\begin{aligned} \langle N+2; s | \hat{P}^\dagger | N; s \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(\Omega - N - s)(N - s + 2)}, \\ \langle N-2; s | \hat{P} | N; s \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(\Omega - N - s + 2)(N - s)}. \end{aligned} \quad (16.40)$$

При малых  $s \sim 1$  и далеко от краёв оболочки  $N \sim \Omega - N \sim \Omega \gg 1$  эти матричные элементы равны друг другу, и их общее значение есть

$$\langle N+2; s | \hat{P}^\dagger | N; s \rangle \approx \langle N-2; s | \hat{P} | N; s \rangle \approx \frac{1}{2} \sqrt{N(\Omega - N)}. \quad (16.41)$$

Мы получили когерентный эффект усиления для передачи конденсатной пары вследствие бозонного стимулированного излучения или поглощения пар, подобно тому что мы видели в сверхизлучении (разд. II.11.9).

Теперь мы можем перейти к одночастичным процессам в присутствии конденсата. Гамильтониан спаривания (16.27) даёт уравнения движения для фермионных операторов рождения и уничтожения,

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{H}] = \varepsilon \hat{a}_\lambda + G \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{P}, \quad [\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{H}] = -\varepsilon \hat{a}_\lambda^\dagger + G \hat{P}^\dagger \hat{a}_\lambda, \quad (16.42)$$

где использовались фермионные правила коммутации (11.14). Мы можем взять матричный элемент  $\langle N; 0 | \cdots | N + 1; 1_\lambda \rangle$  в первом из этих операторных уравнений и  $\langle N; 0 | \cdots | N - 1; 1_\lambda \rangle$  во втором. В обоих случаях  $1_\lambda$  означает состояние с одной неспаренной частицей на орбите  $\lambda$ , но конденсат содержит  $N$  частиц в первом случае и  $N - 2$  во втором. Действие  $\hat{P}$  в первом случае переводит  $N + 1 \rightarrow N - 1$  с тем же  $s = 1$ , а последующее действие  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  создаёт  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра для неспаренной частицы  $\lambda$ , что приводит к конденсату из  $N$  частиц. Во втором случае можно рассуждать подобным образом. Матричные элементы  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$  были вычислены выше. Матричный элемент коммутатора эквивалентен матричному элементу  $\hat{a}$  или  $\hat{a}^\dagger$ , умноженному на разность энергий, известную из (16.34). Таким образом мы приходим к системе линейных уравнений для матричных элементов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ . Эти матричные элементы можно найти с точностью до нормировочного множителя, который можно определить из антикоммулятора (11.14).

В том же приближении, что и в (16.41), мы получаем

$$\langle N; 0 | \hat{a}_\lambda | N + 1; 1_\lambda \rangle = \sqrt{\frac{\Omega - N}{\Omega}}, \quad \langle N; 0 | \hat{a}_\lambda^\dagger | N - 1; 1_\lambda \rangle = \sqrt{\frac{N}{\Omega}}. \quad (16.43)$$

Одночастичные амплитуды не равны 1 или 0, как это было бы в модели независимых частиц. В присутствии конденсата амплитуды — числа между 0 и 1 (так называемые *факторы когерентности*).

При выводе уравнений (16.43) мы на самом деле пренебрегли разницей между конденсатами, содержащими  $N$  или  $N \pm 2$  частиц. Зависимость от  $N$  плавная, и это приближение оправдано при  $N \gg 1$ ; для второй половины оболочки опять нужно использовать число дырок  $\Omega - N$  вместо  $N$  в этой оценке. Мы можем упростить анализ, введя приближённое описание, не использующее состояний с точным числом частиц. Вместо этого в теории используется среднее число частиц для нескольких соседних систем. Это не проблема в макроскопических сверхпроводниках. В случае ядер этот подход

описывает *средние свойства соседних ядер* и может быть недостаточно точным для индивидуальных свойств ядер.

«Среднее» основное состояние  $|0\rangle$  — это то, что мы называли макроскопическим когерентным состоянием в гл. I.14 — суперпозиция основных состояний нескольких чётных систем  $|N; 0\rangle$  в некотором интервале  $\Delta N$  вокруг  $\bar{N}$ , таком, что  $1 \ll \Delta N \ll N$ . Одночастичное возбуждение  $|s = 1_\lambda\rangle$  с квантовыми числами  $\lambda$  может быть получено из основного состояния  $|0\rangle$  с чётным  $N$  действием специального оператора  $\hat{b}_\lambda^\dagger$

$$\hat{b}_\lambda^\dagger|0\rangle = |s = 1_\lambda\rangle. \quad (16.44)$$

Обратите внимание, что здесь амплитуда равна 1. Объект, рождаемый оператором  $\hat{b}_\lambda^\dagger$  или уничтожаемый сопряжённым оператором  $\hat{b}_\lambda$ , приближённо представляет элементарное возбуждение системы. Обычно его называют *Боголюбовской квазичастицей*.

В соответствии с уравнением (16.43), амплитуды рождения *настоящей частицы* из конденсата или дырки на сопряжённой орбите равны

$$\hat{a}_\lambda^\dagger|N; 0\rangle = \sqrt{\frac{\Omega - N}{\Omega}}|N + 1; 1_\lambda\rangle, \quad \hat{a}_{\bar{\lambda}}|N; 0\rangle = \sqrt{\frac{N}{\Omega}}|N - 1; 1_\lambda\rangle. \quad (16.45)$$

Пренебрегая разницей чисел конденсатных частиц в двух случаях в (16.45), мы можем скомбинировать эти выражения и получить оператор квазичастицы (16.44)

$$\hat{b}_\lambda^\dagger = u_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger + v_\lambda \hat{a}_{\bar{\lambda}}, \quad (16.46)$$

где параметры  $u_\lambda$  и  $v_\lambda$  на самом деле не зависят от  $\lambda$  в нашей вырожденной модели

$$u_\lambda = \sqrt{\frac{\Omega - N}{\Omega}}, \quad v_\lambda = \sqrt{\frac{N}{\Omega}}. \quad (16.47)$$

Эрмитово сопряжённый оператор равен

$$\hat{b}_\lambda = u_\lambda^* \hat{a}_\lambda + v_\lambda^* \hat{a}_{\bar{\lambda}}^\dagger. \quad (16.48)$$

Преобразование от частиц  $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$  к квазичастицам  $(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ , изобретённое *Н.Н. Боголюбовым (1958)*, является мощным инструментом в квантовой теории многих тел. В присутствии конденсата есть два пути создания одночастичного возбуждения с квантовыми числами  $\lambda$ : непосредственно создать частицу с такими квантовыми числами (первый член в (16.46)) или уничтожить  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра в конденсатной паре (второй член

в (16.46)), сравните с рассмотрением бозонов в разд. 15.6. Элементарное возбуждение даётся правильной линейной комбинацией этих амплитуд. Оно нормировано естественным образом:

$$|u_\lambda|^2 + |v_\lambda|^2 = 1. \quad (16.49)$$

В системе, инвариантной относительно обращения времени, амплитуды  $u_\lambda$  и  $v_\lambda$  могут быть выбраны действительными и совпадающими для  $\lambda$  и  $\tilde{\lambda}$ . Однако нужно быть осторожным с относительным знаком амплитуд, поскольку вследствие правила (16.4) обращения времени операторы обращённых квазичастиц (в  $\mathcal{T}$ -инвариантной системе) равны

$$\hat{b}_\lambda^\dagger = u_\lambda \hat{a}_{\tilde{\lambda}}^\dagger - v_\lambda \hat{a}_\lambda, \quad \hat{b}_{\tilde{\lambda}} = u_\lambda \hat{a}_{\tilde{\lambda}} - v_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger. \quad (16.50)$$

Ситуация более сложна при отсутствии  $\mathcal{T}$ -инвариантности, например, во внешнем магнитном поле. Тогда амплитуды преобразования становятся в общем случае комплексными.

Квазичастицы опять являются *фермионами*; запрещено повторять создание квазичастицы дважды. Вследствие нормировки (16.49) антикоммутатор сохраняется,

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_{\lambda'}^\dagger]_+ = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (16.51)$$

Остальные антикоммутаторы (11.14) тоже сохраняются. Например,

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_{\lambda'}]_+ = u_\lambda^* v_{\lambda'}^* \delta_{\lambda\tilde{\lambda}'} + v_\lambda^* u_{\lambda'}^* \delta_{\tilde{\lambda}\lambda'}. \quad (16.52)$$

Здесь  $\delta$ -символы отличаются знаком от (16.6), так что

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_{\lambda'}]_+ = \delta_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'} (v_\lambda u_{\tilde{\lambda}} - u_\lambda v_{\tilde{\lambda}})^*. \quad (16.53)$$

Результат равен нулю при правильном выборе фаз  $\mathcal{T}$ -сопряжённых орбит, разность фаз между  $u_{\tilde{\lambda}}$  и  $u_\lambda$  должна быть равна разности фаз между аналогичными множителями  $v$  (это автоматически выполняется в  $\mathcal{T}$ -инвариантном случае). Поэтому преобразование Боголюбова является *каноническим*.

Тогда как оператор (16.46) создаёт элементарное фермиевское возбуждение, его сопряжённый оператор (16.48), действуя на основное состояние, даёт нуль:

$$\hat{b}_\lambda |0\rangle = 0, \quad (16.54)$$

как видно из (16.47,16.48) и (16.45) с учётом правил  $\hat{a}_\lambda = -\hat{a}_\lambda^\dagger$  и при отождествлении конденсатов в обоих членах (16.45). Поэтому основное состояние конденсата является вакуумным состоянием для квазичастиц.

Легко найти обратное преобразование к (16.46) и (16.48):

$$\hat{a}_\lambda = u_\lambda \hat{b}_\lambda - v_\lambda \hat{b}_\lambda^\dagger, \quad \hat{a}_\lambda^\dagger = u_\lambda \hat{b}_\lambda^\dagger - v_\lambda \hat{b}_\lambda. \quad (16.55)$$

С учётом (16.54) среднее значение оператора числа фермионов (11.16) в основном состоянии  $|0\rangle$  оказывается равным

$$n_\lambda = \langle 0 | \hat{n}_\lambda | 0 \rangle = v_\lambda^2 \langle 0 | \hat{b}_\lambda \hat{b}_\lambda^\dagger | 0 \rangle = v_\lambda^2. \quad (16.56)$$

В вырожденной модели (16.47) средние числа заполнения для основного состояния однородны во всём пространстве:

$$n_\lambda = \frac{N}{\Omega}. \quad (16.57)$$

Таким образом, амплитуды  $u_\lambda$  и  $v_\lambda$  характеризуют распределение частиц в основном состоянии

$$v_\lambda = \sqrt{n_\lambda}, \quad u_\lambda = \sqrt{1 - n_\lambda}. \quad (16.58)$$

За исключением амплитуд (16.47), которые в этом специфическом случае не зависят от одночастичных квантовых чисел, существенные результаты для произвольной *невыврожденной* схемы одночастичных уровней очень похожи. Любой оператор для исходной фермионной системы может быть переведён на язык квазичастиц с помощью канонического преобразования, что позволяет вычислять все матричные элементы физических величин. Цена, которую необходимо заплатить за это упрощение, — несохранение числа частиц.

## 16.6. Теория БКШ. Пробная волновая функция

Вооружившись точными результатами в вырожденной модели, мы можем разработать более общий подход, применимый в реалистических ситуациях. Это было впервые сделано в статьях БКШ [100,101] о микроскопической теории сверхпроводимости. Хотя этот метод является приближённым, можно показать, что он даёт точные результаты в пределе больших макроскопических систем. В конечных системах, таких как ядра, как мы уже упоминали, в некоторых случаях точность этого подхода недостаточна.

Рассмотрим общий гамильтониан спаривания для Ферми-системы. Он состоит из независимых частиц с энергиями  $\varepsilon_\lambda$  и спаривательного взаимодействия с матричными элементами, задаваемыми уравнением (16.25). Схема одночастичных уровней  $\varepsilon_\lambda$  произвольна, но сила спаривания предполагается малой по сравнению с энергией Ферми  $\varepsilon_F$  (это может быть неверно для высокотемпературных сверхпроводников). Спаривание эффективно в некотором слое около поверхности Ферми  $\Sigma_F$ . Плотность одночастичных уровней  $\nu_F$  на  $\Sigma_F$  (разд. 13.1) играет важную роль в конечных результатах.

Одночастичные орбиты подразделяются на Крамерсовские дублеты  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ , вырожденные в силу предполагаемой  $\mathcal{T}$ -инвариантности. Мы применим *вариационный метод*. Построим пробную волновую функцию основного состояния, учитывающую существование конденсата пар, и найдём её параметры путём минимизации энергии основного состояния  $E_0$ .

Спаривательное взаимодействие перемещает пару из одного дублета состояний в другой. Для разорванной пары взаимодействие гораздо слабее, и мы пренебрежём им, как делали раньше. Неспаренная частица вредна для всех прочих пар из-за эффекта блокировки. Поэтому мы предположим, что в основном состоянии для чётного числа частиц нет дублетов состояний, занятых только одной частицей. В этом приближении пары всегда движутся по доступному пространству как единое целое. Волновая функция основного состояния — это суперпозиция компонент с разными числами заполнения дублетных состояний. Мы возьмём средние числа заполнения в качестве вариационных параметров. Соответствующие амплитуды — это параметры  $v_\lambda$  и  $u_\lambda$ , уравнение (16.58). В соответствии с  $\mathcal{T}$ -инвариантностью, числа заполнения обеих компонент дублета одинаковы. Для каждого дублета  $v_\lambda = v_{\tilde{\lambda}}$  даёт амплитуду вероятности найти обе компоненты дублета занятыми, тогда как  $u_\lambda = u_{\tilde{\lambda}}$  даёт амплитуду вероятности того, что оба этих состояния пусты. Сумма вероятностей равна 1, уравнение (16.49), поскольку мы пренебрегли вероятностями частичного заполнения только одного из дублетных состояний.

Приближённая волновая функция может быть записана как произведение по всем дублетам:

$$|0\rangle = \prod_{\lambda} \{u_{\lambda} - v_{\lambda} \hat{P}_{\lambda}^{\dagger}\} |\text{vac}\rangle. \quad (16.59)$$

Здесь оператор

$$\hat{P}_{\lambda}^{\dagger} = \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\tilde{\lambda}}^{\dagger} \quad (16.60)$$

аналогичен (16.3) для данного дублета и, в отличие от (16.3), каждый дублет представлен только одним множителем в бесконечном произведении (16.60), где  $|\text{vac}\rangle$  означает абсолютный вакуум, вообще без частиц.

Очевидный недостаток изящно выглядящей волновой функции (16.60) — она не сохраняет число частиц. В бесконечном произведении (16.59) есть даже ненулевая амплитуда, происходящая от перемножения всех множителей  $u$ , соответствующая пустому состоянию  $|\text{vac}\rangle$ ; произведение всех множителей  $v$  даёт бесконечно много частиц; присутствуют также все промежуточные случаи. Однако это обычная ситуация в статистической механике макроскопических систем, где невозможно следить за точным сохранением гигантского числа частиц.

Соответствующий рецепт статистической механики рекомендует использовать *большой канонический ансамбль*, где система считается открытой и число частиц флуктуирует вокруг среднего значения  $\bar{N}$ . Нужное среднее значение обеспечивается введением *химического потенциала*  $\mu$ , как мы это делали для бозонов в присутствии конденсата в разд. 15.2: гамильтониан  $\hat{H}$  заменяется на

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}. \quad (16.61)$$

Все собственные состояния зависят от значения  $\mu$ , которое потом выбирается таким образом, что среднее значение  $\hat{N}$  по основному состоянию равно нужному среднему числу частиц

$$\langle \hat{N} \rangle_\mu = \bar{N}. \quad (16.62)$$

Это уравнение задаёт необходимое значение  $\mu$ .

В равновесной макроскопической системе флуктуации числа частиц растут как  $\Delta N \sim \sqrt{N}$ , и их *относительная* роль мала,  $\Delta N/\bar{N} \sim 1/\sqrt{N}$ . Это то же самое, что и раньше, когда мы пренебрегали различием конденсатов. В ядерных задачах может быть желательно улучшить приближение, убрав фиктивные флуктуации числа частиц. Здесь мы будем действовать, как в статистической механике, вводя химический потенциал (16.61).

Гамильтониан, обобщающий (16.27), может быть записан через одночастичные энергии  $\varepsilon_\lambda$  и матричные элементы (16.25) как

$$\hat{H}' = \sum_\lambda 2\varepsilon'_\lambda \hat{n}_\lambda + \sum_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \hat{P}_\lambda^\dagger \hat{P}_{\lambda'}, \quad (16.63)$$

где суммы теперь берутся по дублетам. Здесь одночастичные энергии сдвинуты на химический потенциал,  $\varepsilon'_\lambda = \varepsilon_\lambda - \mu$ . Практически спаривание

сконцентрировано вблизи  $\Sigma_F$ , так что химический потенциал совпадает со своим невозмущённым значением  $\varepsilon_F$ , уравнение (13.9). Наша пробная волновая функция предполагает ненулевое заполнение ( $v_\lambda$ ) выше  $\Sigma_F$  и присутствие дырок ( $u_\lambda$ ) ниже  $\Sigma_F$ . Это дало бы более высокую энергию для невзаимодействующих частиц. Но этот проигрыш будет более чем скомпенсирован выигрышем в энергии взаимодействия.

## 16.7. Минимизация энергии

Вычислим среднее значение

$$E_0 = \langle 0|H'|0\rangle \quad (16.64)$$

сдвинутого гамильтониана (16.63) по пробному состоянию (16.59). Истинная энергия системы в этом приближении отличается от этого значения на  $\mu\langle N\rangle$ .

В члене независимых частиц оператор  $\hat{n}_\lambda$  просто заменяется на своё среднее значение  $v_\lambda^2$ . В члене взаимодействия рассмотрим элемент с переходом  $\lambda' \rightarrow \lambda$  для  $\lambda \neq \lambda'$ . Он даёт ненулевой вклад в (16.64), если в начальном состоянии (правая часть матричного элемента (16.64)) дублет  $\lambda'$  заполнен (амплитуда  $v_{\lambda'}$ ), а дублет  $\lambda$  пуст (амплитуда  $u_\lambda$ ). С другой стороны, в конечном состоянии (левая сторона матричного элемента) дублет  $\lambda'$  должен быть пуст (амплитуда  $u_{\lambda'}$ ), тогда как дублет  $\lambda$  заполнен рассеянной парой (амплитуда  $v_\lambda$ ). Множители произведения (16.59), не участвующие в рассматриваемом процессе, проносятся без изменений и дают 1 в силу нормировки (16.49).

Мы приходим к полной энергии в виде суммы энергий независимых частиц и вкладов всех возможных процессов рассеяния пар

$$E_0 = \sum_{\lambda} 2\varepsilon'_{\lambda} v_{\lambda}^2 + \sum_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P u_{\lambda} v_{\lambda} u_{\lambda'} v_{\lambda'}. \quad (16.65)$$

Диагональные члены взаимодействия с  $\lambda' = \lambda$  дают  $\sum_{\lambda} U_{\lambda\lambda}^P v_{\lambda}^4$  — однократную сумму вместо двойной суммы в (16.65). Поэтому их вклад меньше на множитель  $\sim \Omega$  и может быть опущен.

Чтобы произвести минимизацию по  $u_{\lambda}$  и  $v_{\lambda}$ , связанным условием нормировки (16.49), мы выражаем их через числа заполнения, как в (16.58):

$$E_0 = \sum_{\lambda} 2\varepsilon'_{\lambda} n_{\lambda} + \sum_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \sqrt{n_{\lambda}(1-n_{\lambda})n_{\lambda'}(1-n_{\lambda'})}. \quad (16.66)$$

Все  $n_\lambda$  независимы, поскольку о сохранении числа частиц (в среднем) заботится химический потенциал.

Варьирование энергии (16.66) даёт систему уравнений

$$\frac{\partial E_0}{\partial n_\lambda} = 0 \quad (16.67)$$

для каждого  $\lambda$ . Индексы  $\lambda$  и  $\lambda'$  в (16.66) эквивалентны, и каждый из них может совпадать с внешним  $\lambda$  в (16.67). Мы оставляем только один вклад и умножаем результат на 2. Дифференцирование приводит к

$$2\varepsilon'_\lambda + 2 \frac{1 - 2n_\lambda}{2\sqrt{n_\lambda(1 - n_\lambda)}} \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \sqrt{n_{\lambda'}(1 - n_{\lambda'})} = 0. \quad (16.68)$$

Введём обозначение

$$\Delta_\lambda = - \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \sqrt{n_{\lambda'}(1 - n_{\lambda'})} = - \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P u_{\lambda'} v_{\lambda'}. \quad (16.69)$$

Знак минус выбран потому, что нас интересует случай притяжения, когда матричные элементы в основном отрицательны. Условия минимума (16.68) принимают вид

$$2\varepsilon'_\lambda \sqrt{n_\lambda(1 - n_\lambda)} = \Delta_\lambda(1 - 2n_\lambda). \quad (16.70)$$

Стоит ввести ещё одно обозначение:

$$E_\lambda = +\sqrt{\varepsilon'^2_\lambda + \Delta^2}. \quad (16.71)$$

Тогда после простой алгебры мы получаем решение квадратного уравнения (16.70) для чисел заполнения

$$n_\lambda = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda} \right). \quad (16.72)$$

Величина  $\Delta_\lambda$ , уравнение (16.69), аккумулирует эффекты спаривания. Без спаривательного взаимодействия  $E_\lambda \rightarrow |\varepsilon'_\lambda|$ , так что

$$n_\lambda \rightarrow n_\lambda^\circ = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\varepsilon'_\lambda}{|\varepsilon'_\lambda|} \right). \quad (16.73)$$

Одночастичные энергии  $\varepsilon'_\lambda$  положительны выше  $\mu$  и отрицательны ниже  $\mu$ . Поэтому мы должны выбрать знак минус в (16.73), чтобы гарантировать

правильные числа заполнения, равные 1 ниже  $\mu$  и 0 выше  $\mu$ . Конечно, это просто определение энергии Ферми,  $\mu = \varepsilon_F$ .

В присутствии сил спаривания величина  $E_\lambda$  отлична от  $|\varepsilon'_\lambda|$  в слое  $\delta\varepsilon \sim \Delta$  около  $\Sigma_F$ , где  $\Delta \ll \varepsilon_F$  — среднее значение  $\Delta_\lambda$ . Вне этого слоя можно пренебречь  $\Delta_\lambda$  и вернуться к невозмущённым числам заполнения (16.73). Поэтому мы опять должны выбрать нижний знак в (16.72). Следовательно, решение задачи минимизации — это

$$v_\lambda^2 = n_\lambda = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda} \right), \quad u_\lambda^2 = 1 - n_\lambda = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda} \right). \quad (16.74)$$

Однако это всего лишь формальное решение, поскольку величина  $\Delta_\lambda$ , входящая в  $E_\lambda$ , зависит от чисел заполнения по определению (16.69).

## 16.8. Энергетическая щель

Неизвестную величину  $\Delta_\lambda$  обычно называют *энергетической щелью*, потому что, как мы увидим, её величина определяет минимальную энергию возбуждения вблизи  $\Sigma_F$ , где невозмущённая энергия  $\varepsilon' = \varepsilon - \mu$  мала. Чтобы найти  $\Delta_\lambda$ , мы должны подставить параметры (16.74) в (16.69), что приводит к нелинейному уравнению для  $\Delta_\lambda$ .

Комбинация, входящая в уравнение (16.69), — это

$$u_\lambda v_\lambda = \sqrt{n_\lambda(1 - n_\lambda)} = \frac{\Delta_\lambda}{2E_\lambda}. \quad (16.75)$$

Она исчезает в нормальном пределе (без спаривания), когда все числа заполнения равны 1 или 0. Уравнения (16.75) и (16.69) приводят к интегральному уравнению для  $\Delta_\lambda$ :

$$\Delta_\lambda = - \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \frac{\Delta_{\lambda'}}{2E_{\lambda'}}. \quad (16.76)$$

Это уравнение играет фундаментальную роль в теории сверхпроводимости БКШ. Тривиальное решение  $\Delta_\lambda = 0$  (нормальный Ферми-газ) всегда возможно. Чтобы найти *нетривиальное* решение — если оно существует — мы примем некоторые свойства потенциала спаривания, которые определяют существование и симметрию  $\Delta_\lambda$ .

В однородной макроскопической системе пары характеризуются полным импульсом  $\mathbf{P}$ , сохраняющимся в процессах рассеяния, и относительным импульсом  $\mathbf{p}$ . Полный импульс каждой пары должен быть равен нулю в

основном состоянии без тока. Абсолютные величины  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$  близки к  $p_F$ , и рассеяние описывается углом между начальным относительным импульсом  $\mathbf{p}'$  и конечным  $\mathbf{p}$ . Матричный элемент  $U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^P$  как функцию этого угла можно разложить по полиномам Лежандра. Конденсат формируется парами в состоянии относительного движения (парциальной волне), соответствующем максимальному притяжению. Обычно это происходит в  $s$ -волне, и потому в синглетном по спину состоянии. В сверхтекучем  ${}^3\text{He}$ , где спаривание происходит в триплетном по спину  $p$ -состоянии, есть несколько термодинамических фаз, отличающихся связью между спином и орбитальным моментом [103].

Для  $s$ -волнового спаривания матричные элементы взаимодействия не зависят от угла рассеяния, и их можно заменить на эффективную константу. Ситуация в ядрах качественно похожа, хотя матричные элементы различны для разных комбинаций  $\lambda$  и  $\lambda'$ . Простое приближение (16.26) эффективной константой в некотором слое около  $\Sigma_F$  (и нулём вне этого слоя) может дать разумную оценку:

$$U_{\lambda\lambda'}^P \approx -G\theta_\lambda\theta_{\lambda'}, \quad (16.77)$$

где обрезающие множители  $\theta_{\lambda'}$  ограничивают пространство спаривания внутренностью энергетического слоя  $-\xi \leq \varepsilon'_\lambda \leq +\xi$  вблизи  $\Sigma_F$ . В этом приближении

$$\Delta_\lambda = G\theta_\lambda \sum_{\lambda'} \frac{\Delta_{\lambda'}}{2E_{\lambda'}} \theta_{\lambda'}, \quad (16.78)$$

так что  $\Delta_\lambda$  — константа внутри слоя,

$$\Delta_\lambda = \theta_\lambda \Delta. \quad (16.79)$$

Нетривиальное значение  $\Delta$  удовлетворяет уравнению

$$1 = G \sum_{\lambda} \frac{1}{2E_\lambda} \theta_\lambda, \quad (16.80)$$

где  $\Delta$  входит в знаменатель через  $E_\lambda$ , уравнение (16.71).

Чтобы решить уравнение (16.80), заменим суммирование по слою интегрированием по одночастичным энергиям с плотностью уровней  $\nu'(\varepsilon) \approx \nu'_F$  на  $\Sigma_F$ . Эта плотность уровней считает вырожденные дублеты, и потому отличается от  $\nu_F$  (13.11) множителем  $1/2$ . Тонкий аспект этой замены состоит в том, что в *дискретном спектре* уравнение (16.80) может не иметь решений, что означало бы  $\Delta = 0$ . Взаимодействие должно быть достаточно сильным, чтобы обеспечить образование конденсата процессами рассеяния

пар, преодолевая интервалы между уровнями дискретного спектра. Действительно, минимальное значение знаменателя в (16.80) — это  $|\varepsilon'_\lambda|$ . Тогда критическая сила спаривания  $G_c$  определяется соотношением [105]

$$1 = G_c \sum_\lambda \frac{\theta_\lambda}{2|\varepsilon'_\lambda|}. \quad (16.81)$$

Нетривиальное решение с дискретным спектром отсутствует при  $G < G_c$ . Если перейти к *непрерывному спектру*, то интеграл в (16.81) имеет логарифмическую особенность на  $\Sigma_F$ , где  $\varepsilon' \rightarrow 0$ . Тогда  $G_c \rightarrow 0$ , и конденсат появляется при *сколь угодно слабом* взаимодействии. Это значит, что в *макроскопической* Ферми-системе нормальное состояние *нестабильно* по отношению к силам притяжения, вызывающим образование конденсата пар (*эффект Купера*).

В *конечной* системе замена суммы интегралом оправдана только тогда, когда сила спаривания *сверхкритична*, в противном случае корреляции спаривания будут потеряны. С сильным спариванием в непрерывном приближении интегрирование сводится к

$$1 = G \int_{-\xi}^{+\xi} d\varepsilon' \frac{\nu'(\varepsilon')}{2\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}} \approx G\nu'_F \int_0^\xi d\varepsilon' \frac{1}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}} \quad (16.82)$$

и может быть легко произведено:

$$1 = G\nu'_F \ln \frac{\xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{\Delta} \approx G\nu'_F \ln \frac{2\xi}{\Delta}, \quad (16.83)$$

где мы предположили, что  $\Delta \ll \xi$ . Наконец, модель даёт решение для параметра щели

$$\Delta \approx 2\xi \exp\left(-\frac{1}{G\nu'_F}\right). \quad (16.84)$$

Результат является *неаналитической* функцией силы  $G$  при  $G \rightarrow 0$  (существенная особенность не позволяет разлагать в ряд Тэйлора), и он не может быть выведен в теории возмущений даже при малом  $G$  (ещё одно свидетельство неустойчивости нормального моря Ферми относительно притягивающих взаимодействий). Однако нужно помнить, что это заключение справедливо только для макроскопических систем, тогда как для конечных систем весь метод не работает в случае слабого взаимодействия.

Возвращаясь к параметрам (16.74) волновой функции, мы получаем простую картину одночастичных чисел заполнения для постоянной (или

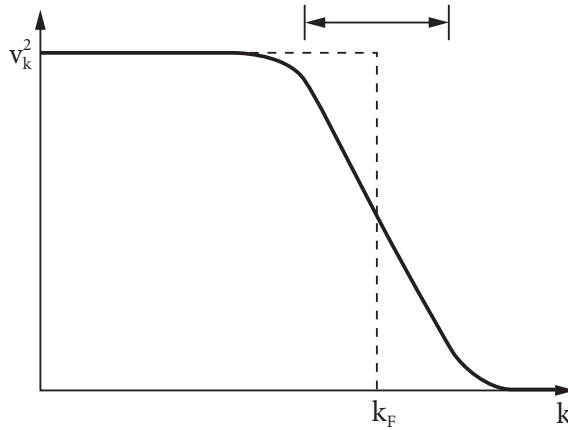


Рис. 16.1. Средние числа заполнения для нормального Ферми-газа (пунктирная линия) и для нетривиального решения БКШ (сплошная линия)

медленно меняющейся, как функция  $\lambda$ ) энергетической щели  $\Delta$ . Числа заполнения, вместо резкого разрыва в нормальном Ферми-газе, плавно уменьшаются от единицы существенно ниже  $\Sigma_F$  до нуля существенно выше  $\Sigma_F$ . Ширина переходной области энергий порядка  $\Delta$ , т.е. меньше ширины слоя взаимодействия  $\sim 2\xi$  (эта ширина  $\sim k_F(2\Delta/\varepsilon_F)$  в импульсной шкале на рис. 16.1).

### Задача 16.6

Покажите, что результаты вариационного подхода можно получить с помощью метода канонического преобразования, предполагая, что квазичастичные операторы определены как в (16.46) и (16.48). Выразите гамильтониан через новые операторы  $\hat{b}$  и  $\hat{b}^\dagger$ , используя обратное преобразование (16.55). С помощью коммутационных соотношений приведите преобразованный гамильтониан к нормальной форме по отношению к  $\hat{b}$  и  $\hat{b}^\dagger$ . Члены взаимодействия, билинейные по операторам, имеют два типа структур,  $\hat{b}^\dagger\hat{b}$  и  $(\hat{b}\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger)$ . Второй тип соответствует «опасным диаграммам» создания или уничтожения двух квазичастиц. Их присутствие сделало бы систему нестабильной. Выбор параметров  $u$ ,  $v$  канонического преобразования, обращающий в нуль опасные члены, определяет стабильное основное состояние (сравните с разд. I.12.7). Покажите, что для гамильтониана спаривания получившиеся параметры совпадают с теми, которые были найдены вариационным методом.

Мы можем непосредственно проверить, что квазичастичные операторы, найденные в вырожденной модели, имеют точно такие же свойства в реалистическом случае, если они определены с соответствующими амплитудами

$u, v$ . Действительно, подействуем оператором рождения квазичастицы  $\hat{b}_\lambda^\dagger$ , уравнение (16.46), на основное состояние (16.59). Член  $u_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger$  помещает частицу в пустую орбиталь  $|\lambda\rangle$ , которая имела амплитуду  $u_\lambda$ . Член  $v_\lambda \hat{a}_{\bar{\lambda}}$  уничтожает  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра из конденсатной пары, которая присутствовала с амплитудой  $v_\lambda$ . Суперпозиция этих двух амплитуд даёт, в согласии с (16.44),

$$\hat{b}_\lambda^\dagger |0\rangle = \hat{a}_\lambda^\dagger \prod_{\lambda' \neq \lambda} \{u_{\lambda'} - v_{\lambda'} \hat{P}_{\lambda'}^\dagger\} |\text{vac}\rangle, \quad (16.85)$$

что есть в точности состояние (16.44) с  $s = 1$ .

### Задача 16.7

Проверьте, что основное состояние (16.59) удовлетворяет вакуумному условию для квазичастиц (16.54).

## 16.9. Спектр возбуждений

Величина  $E_\lambda$ , введённая в процессе решения, уравнение (16.71), имеет важный физический смысл, оправдывающий это обозначение. Эта энергия связана с дополнительной валентной частицей, которая блокирует уровни пар и уменьшает общий выигрыш энергии при образовании конденсата.

Добавим частицу на орбиту  $\lambda$  к спаренной чётной системе и вычислим энергию  $W_\lambda$  получившегося состояния. При этом добавляется энергия занятой орбиты относительно энергии Ферми ( $\varepsilon'_\lambda$ ) и вместо энергии удаляемой пары  $2\varepsilon'_\lambda v_\lambda^2$  в (16.65). Но вблизи  $\Sigma_F$  одночастичная энергия  $\varepsilon'_\lambda$  мала, добавочная частица попадает почти на поверхность Ферми. Однако есть другой эффект, связанный с блокировкой состояния пары, ставшего недоступным для рассеяния других пар. Этот вклад оказывается конечным на  $\Sigma_F$  из-за суммирования по многим состояниям пар. Эффект происходит от второго члена в (16.65), где мы должны теперь вычеркнуть вклады заблокированной орбиты из обеих сумм, по  $\lambda$  и по  $\lambda'$ , что даёт равные вклады. В результате полная энергия, связанная с добавочной частицей, равна

$$W_\lambda = \varepsilon'_\lambda (1 - 2v_\lambda^2) - 2u_\lambda v_\lambda \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P u_{\lambda'} v_{\lambda'}. \quad (16.86)$$

Сумма в (16.86) равна  $-\Delta_\lambda$ , уравнение (16.69). Используя значения параметров (16.71, 16.74) и (16.75), мы приходим к

$$W_\lambda = \varepsilon'_\lambda \left(1 - 1 + \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda}\right) - 2 \frac{\Delta_\lambda}{2E_\lambda} (-\Delta_\lambda) = \frac{(\varepsilon'_\lambda)^2 + \Delta_\lambda^2}{E_\lambda} = E_\lambda. \quad (16.87)$$

Таким образом, величину  $E_\lambda$  можно назвать *энергией квазичастицы*. Именно эта энергия добавляется к системе при возбуждении, производимом оператором рождения квазичастицы (16.44). Теперь смысл термина *энергетическая щель* становится яснее. На  $\Sigma_F$  собственная энергия добавляемой частицы стремится к нулю, но минимальная энергия возбуждения конечна и равна  $\Delta$ . Она происходит исключительно от блокирующего влияния добавочной частицы на все другие пары.

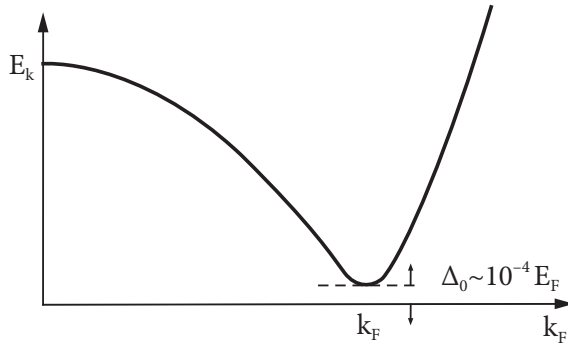


Рис. 16.2. Спектр одночастичных возбуждений вблизи поверхности Ферми в системе со спариванием

В нормальной макроскопической системе спектр одночастичных возбуждений вблизи  $\Sigma_F$  является линейной функцией импульса:

$$W_p = \varepsilon(p) - \varepsilon_F \approx v_F(p - p_F), \quad p > p_F. \quad (16.88)$$

То же верно и для дырочных возбуждений:

$$W_p = \varepsilon_F - \varepsilon(p) \approx v_F(p_F - p), \quad p < p_F; \quad (16.89)$$

в обоих случаях  $v_F$  — скорость на поверхности Ферми. Этот спектр имеет две ветви, для частиц и дырок, которые соединяются на  $\Sigma_F$ , где энергия возбуждения обращается в нуль (рис. 16.2). В системе со спариванием мы имеем плавное поведение со щелью  $\Delta$  на  $\Sigma_F$ . Подобно уравнению Дирака, щель (16.71) играет роль массы в спектре возбуждений, в её отсутствие одночастичный спектр был бы линейным по импульсу (16.88, 16.89), как для безмассовой частицы. Возбуждения теперь имеют смешанную частично-дырочную природу, что отражено в квазичастичном каноническом преобразовании (16.50).

Чтобы возбудить *чётную* систему, мы должны разорвать одну из пар. Если после этого партнёры занимают одночастичные орбиты  $\lambda$  и  $\lambda'$ , то энергия возбуждения равна

$$W_{\lambda\lambda'} = E_\lambda + E_{\lambda'}. \quad (16.90)$$

Очевидно, такие возбуждения начинаются с более высокого порога, равного  $(W_{\lambda\lambda'})_{\min} = 2\Delta$ , что соответствует появлению двух квазичастиц. Такое поведение необходимо для *сверхтекучести* в макроскопической системе. Действительно, критерий сверхтекучести Ландау (15.43) определяет конечную критическую скорость

$$u_c = \frac{W_{\min}}{P_{\max}} = \frac{2\Delta}{2p_F} = \frac{\Delta}{p_F}. \quad (16.91)$$

В заряженной Ферми-жидкости незатухающий ток означает *сверхпроводимость*. Изучение электродинамики сверхпроводников [82, 106] выходит за рамки нашего курса.

В гл. I.14 мы описывали основные черты сверхпроводящего состояния с помощью макроскопической когерентной волновой функции. В микроскопическом подходе эту роль по существу играет щель  $\Delta$ , которая в состоянии с током приобретает фазу, зависящую от координат, а ток пропорционален градиенту этой фазы. Пространственная протяжённость макроскопической волновой функции определяет так называемую *длину когерентности*  $l_c$ . Величина щели  $\Delta$  указывает энергетический слой вокруг  $\Sigma_F$ , где есть скоррелированные конденсатные пары; в соответствии с уравнением (16.75), это область размывания поверхности Ферми. Неопределённость импульса этого волнового пакета можно оценить как  $\delta p \sim \Delta/v_F$ , и пространственная длина когерентности есть  $l_c \sim \hbar/\delta p \sim \hbar v_F/\Delta$ . Эта длина обычно превосходит расстояние между частицами на 2–3 порядка. В ядрах формально вычисленная длина когерентности больше размера ядра. Пары слабо связаны и существенно перекрываются. При сильном притяжении образовались бы тесно связанные молекулы, что заметно отличается от картины БКШ. Переход между двумя режимами, от слабо связанного собрания куперовских пар к конденсату бозонных молекул, может наблюдаться в атомных ловушках с регулируемой эффективной силой взаимодействия [107].

Резюмируя основные черты спектра возбуждений системы со спариванием, мы можем использовать схему сеньорити, развитую исходно для вырожденной модели. Классификация состояний по числу  $s$  неспаренных частиц особенно полезна в ядрах и других конечных системах. Энерге-

тическая щель в этой модели даётся уравнением (16.42). Теперь мы можем распространить это описание на реалистический случай. Основное состояние имеет  $s = 0$ , первые возбуждённые состояния чётной системы соответствуют  $s = 2$ , тогда как основное состояние ядра с нечётным  $A$  имеет  $s = 1$ . Спектр возбуждений чётной системы имеет щель  $2\Delta$ ; спектр возбуждений нечётной системы не имеет щели, поскольку неспаренную частицу можно возбудить на другую орбиту без сильного искажения конденсата. В нечётной системе при энергиях  $\sim 2\Delta$  находятся состояния с тремя квазичастицами,  $s = 3$ . Эта конструкция легко может быть продолжена.

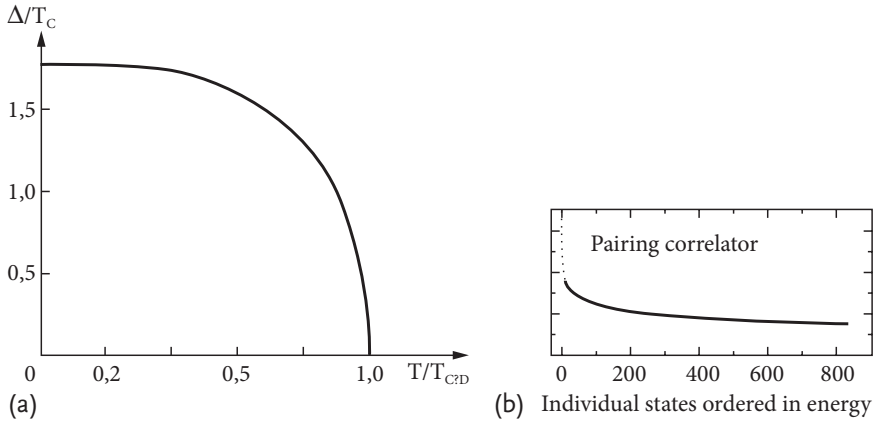


Рис. 16.3. Типичная зависимость в мезоскопической системе: а — макроскопической щели от температуры; б — корреляционной энергии спаривания от энергии возбуждения

Состояния с большим сеньорити становятся всё менее и менее скоррелированными. Каждый раз нужно решать уравнение для щели, подобное (16.76), но с новыми числами заполнения, включая эффект блокировки. Если вероятность найти неспаренную частицу на орбите  $\lambda$  равна  $f_\lambda$  (не путать эту функцию с числами заполнения пар  $n_\lambda$ , присутствующими уже в основном состоянии (16.59)), то вероятность найти дублет состояний  $(\lambda, \tilde{\lambda})$  пустым от неспаренных частиц и доступным для рассеяния пар равна

$$p_\lambda = 1 - f_\lambda - f_{\tilde{\lambda}}. \quad (16.92)$$

Тогда вместо главного уравнения (16.76) мы получим

$$\Delta_\lambda = - \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \frac{\Delta_{\lambda'}}{2E_{\lambda'}} p_{\lambda'}. \quad (16.93)$$

Это происходит, когда энергия возбуждения (которую можно обсуждать также на языке *температуры*  $T$ ) растёт, увеличивая вероятности  $f_\lambda(T)$  теплового возбуждения квазичастиц. Нетривиальное решение  $\Delta \neq 0$  уменьшается с температурой и обращается в нуль при критической температуре  $T_c$ , которую можно найти из (16.93) с  $\Delta = 0$ . В макроскопической системе это наблюдается как фазовый переход из сверхпроводящего состояния в нормальное (рис. 16.3, а). В мезоскопических системах, таких как ядра, нет резкого фазового перехода, но  $\Delta$  постепенно уменьшается. Когда она становится меньше среднего интервала между энергиями орбит в нормальной системе, уже не имеет смысла говорить о щели в спектре. На рис. 16.3, б [108] показан коррелятор  $\langle P^\dagger P \rangle$ , аналог энергии спаривания в уравнениях (16.27 и (16.101)), для всех состояний со спином  $J = 0$  и изоспином  $T = 0$  в оболочечной модели ядра  $^{28}\text{Si}$ , ограниченных  $1s$ - и  $0d$ -орбиталями, близкими к поверхности Ферми. Только низшие состояния показывают развитое (изоспининвариантное) спаривание; число валентных частиц слишком мало: 6 протонов и 6 нейтронов.

Квазичастичные возбуждения в чётной системе, вытолкнутые выше порога  $2\Delta$ , увеличивают *плотность уровней* в этом районе. Новая плотность уровней  $\nu_{q-p}(E)$  неспаренных частиц с энергией  $E = \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}$  (уравнение (16.81)) равна, как обычно, числу уровней  $dn/dE$  на единичный интервал энергии. В терминах невозмущённой плотности уровней  $\nu(\varepsilon)$

$$\nu_{q-p}(E) = \frac{dn}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dE} = \nu \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}, \quad E > \Delta. \quad (16.94)$$

В макроскопической системе эта функция имеет (интегрируемую) особенность на пороге из-за скопления квазичастичных состояний, вытолкнутых из щели (рис. 16.4).

## 16.10. Энергия конденсации

Теперь мы можем обосновать, что сверхпроводящее состояние с нетривиальным решением  $\Delta$  энергетически выгодно по сравнению с нормальным состоянием с  $\Delta = 0$ .

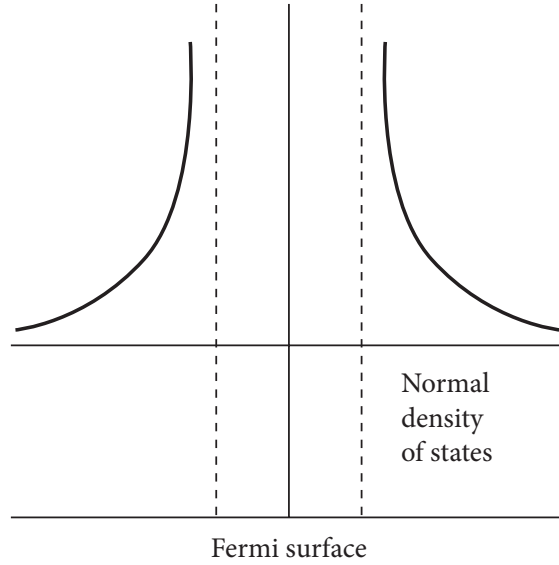


Рис. 16.4. Плотность квазичастичных (квазидырочных) уровней в сверхпроводящей системе

В модели с постоянными матричными элементами (16.76) энергия основного состояния  $E_0$  (с несущественным сдвигом на  $\mu\langle N \rangle$ ) равна

$$E_0 = 2 \sum_{\lambda} \varepsilon'_{\lambda} v_{\lambda}^2 - G \left( \sum_{\lambda} u_{\lambda} v_{\lambda} \theta_{\lambda} \right)^2. \quad (16.95)$$

Здесь достаточно рассмотреть только энергетический слой толщиной  $\xi$  вокруг  $\Sigma_F$ , где распределение частиц отлично от случая нормальной Ферми-системы. Вклад первого члена в (16.95) может быть выражен через интеграл, как в (16.82):

$$E_0^{(1)} \approx \nu'_F \int_{-\xi}^{\xi} d\varepsilon' \varepsilon' \left( 1 - \frac{\varepsilon'}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}} \right). \quad (16.96)$$

Второй член в (16.95) равен, как видно из (16.78),  $\Delta^2/2G$ . Используя уравнение (16.82), мы опять переписываем его в интегральном виде:

$$E_0^{(2)} = -\frac{\Delta^2}{2G} \approx -\frac{1}{2} \Delta^2 \nu'_F \int_{-\xi}^{\xi} \frac{d\varepsilon'}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}}. \quad (16.97)$$

Чтобы найти энергию конденсации  $E_{\text{cond}}$ , нам нужно вычислить разность между энергиями основных состояний спаренной и нормальной системы, последняя равна сумме всех одночастичных орбит ниже  $\Sigma_F$ :

$$E_{\text{norm}} \approx 2\nu'_F \int_{-\xi}^0 d\varepsilon' \varepsilon'. \quad (16.98)$$

### Задача 16.8

Вычислите энергию конденсации

$$E_{\text{cond}} = E_0^{(1)} + E_0^{(2)} - E_{\text{norm}}. \quad (16.99)$$

### Решение.

Собирая все члены и производя интегрирование, мы получаем

$$E_{\text{cond}} = \nu'_F \left( \xi^2 - \xi \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \right). \quad (16.100)$$

Эта энергия отрицательна при любом ненулевом значении параметра щели. Таким образом, нетривиальное решение *энергетически предпочтительно*. В приближении  $\xi \gg \Delta$ , которое использовалось в (16.83),

$$E_{\text{cond}} = -\frac{1}{2} \Delta^2 \nu'_F. \quad (16.101)$$

Этот результат имеет простой физический смысл: спаривание существенно меняет одночастичный энергетический спектр в интервале порядка  $\Delta$ . Этот интервал содержит  $\nu_F \Delta$  состояний. Каждое из них приобретает добавочную энергию связи порядка  $\Delta$ .

В макроскопических сверхпроводниках энергия конденсации в единице объёма (полная плотность уровней пропорциональна объёму) равна плотности энергии магнитного поля  $\mathcal{B}_c^2/8\pi$ , которое нужно, чтобы разрушить сверхпроводимость. Поэтому уравнение (16.101) прямо определяет критическое магнитное поле  $\mathcal{B}_c$ .

## 16.11. Амплитуды переходов

Как мы обсуждали в связи с процессами передачи (16.41), факторы когерентности, определяемые свойствами конденсата, сильно влияют на вероятности переходов. Посмотрим на матричные элементы одночастичных

операторов, которые определяют мультипольные моменты и радиационные переходы в ядрах и процессы типа спиновой релаксации и поглощения света в макроскопических сверхпроводниках.

Общий одночастичный оператор, не меняющий число частиц, может быть записан как (11.37):

$$\hat{Q} = \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda'}, \quad (16.102)$$

где сумма берётся по всем одночастичным орбитам. Чтобы найти его действие на спаренную систему, мы производим каноническое преобразование (16.55) к квазичастицам. Результирующий оператор содержит члены  $Q_{\Delta s}$  с разными правилами отбора по сеньорити  $\Delta s$ .

Сначала рассмотрим вклады  $\sim \hat{b}^{\dagger} \hat{b}$ , сохраняющие число квазичастиц,  $\Delta s = 0$ . Имеется два члена этого типа:

$$Q_0 = \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} \left( u_{\lambda} u_{\lambda'} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda'} + v_{\lambda} v_{\lambda'} \hat{b}_{\bar{\lambda}} \hat{b}_{\bar{\lambda}'}^{\dagger} \right). \quad (16.103)$$

Второй член в (16.103) можно привести к нормальной форме

$$\hat{b}_{\bar{\lambda}} \hat{b}_{\bar{\lambda}'}^{\dagger} = \delta_{\lambda\lambda'} - \hat{b}_{\bar{\lambda}'}^{\dagger} \hat{b}_{\bar{\lambda}}. \quad (16.104)$$

Таким образом, мы извлекаем неоператорный член (диагональное среднее значение)

$$\bar{Q} = \sum_{\lambda} q_{\lambda\lambda} n_{\lambda}, \quad (16.105)$$

который определяется числами заполнения  $n_{\lambda} = v_{\lambda}^2$ . Два операторных члена с  $\Delta s = 0$  комбинируются в оператор, ответственный за процесс рассеяния квазичастицы полем  $Q$ :

$$\hat{Q}_0 = \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} \left( u_{\lambda} u_{\lambda'} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda'} - v_{\lambda} v_{\lambda'} \hat{b}_{\bar{\lambda}'}^{\dagger} \hat{b}_{\bar{\lambda}} \right). \quad (16.106)$$

Во втором члене (16.106) мы можем сделать замену переменных суммирования,  $\bar{\lambda} \rightarrow \lambda'$ ,  $\bar{\lambda}' \rightarrow \lambda$ , сделав операторы такими же, как и в первом члене. В  $\mathcal{T}$ -инвариантной системе амплитуды  $u$ ,  $v$  не меняются при обращении времени. Окончательный ответ зависит от свойств поля  $Q$  по отношению к обращению времени.

Для  $\mathcal{T}$ -чётного поля  $q_{\lambda\lambda'} = q_{\tilde{\lambda}'\tilde{\lambda}}$  матричный элемент  $M_{\lambda\lambda'}$  рассеяния квазичастиц  $\hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_{\lambda'}$  равен

$$M_{\lambda\lambda'}^{(+)} = q_{\lambda\lambda'}(u_\lambda u_{\lambda'} - v_\lambda v_{\lambda'}). \quad (16.107)$$

В  $\mathcal{T}$ -нечётном случае  $q_{\lambda\lambda'} = -q_{\tilde{\lambda}'\tilde{\lambda}}$  матричный элемент содержит другой фактор когерентности

$$M_{\lambda\lambda'}^{(-)} = q_{\lambda\lambda'}(u_\lambda u_{\lambda'} + v_\lambda v_{\lambda'}). \quad (16.108)$$

На диагональный матричный элемент  $\mathcal{T}$ -нечётного мультипольного момента спаривание не влияет:

$$M_{\lambda\lambda}^{(-)} = q_{\lambda\lambda}(u_\lambda^2 + v_\lambda^2) = q_{\lambda\lambda}. \quad (16.109)$$

Например, магнитный момент квазичастицы на данной ядерной орбите сохраняет Шмидтовское значение, как мы видели в схеме сенъорити (16.23).

Амплитуда рождения двух квазичастиц тем же полем (разрыв пары) даётся членом  $\Delta s = 2$ :

$$Q_2 = - \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} u_\lambda v_{\lambda'} \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_{\lambda'}. \quad (16.110)$$

Есть две возможности произвести две квазичастицы  $\hat{b}_{\mu'}^\dagger \hat{b}_\mu^\dagger$ :  $\lambda = \mu, \lambda' = \mu'$  и  $\lambda = \tilde{\mu}', \tilde{\lambda}' = \mu$ . Опять для  $\mathcal{T}$ -чётного поля  $Q$  мы получаем матричный элемент

$$P_{\lambda\lambda'}^{(+)} = q_{\lambda\lambda'}(u_\lambda v_{\lambda'} + u_{\lambda'} v_\lambda). \quad (16.111)$$

В  $\mathcal{T}$ -нечётном случае амплитуда равна

$$P_{\lambda\lambda'}^{(-)} = q_{\lambda\lambda'}(u_\lambda v_{\lambda'} - u_{\lambda'} v_\lambda). \quad (16.112)$$

Теперь рождение диагональной пары  $\lambda = \lambda'$  запрещено,  $P_{\lambda\lambda}^{(-)} = 0$ . Это пара с квантовыми числами конденсата, и поэтому она  $\mathcal{T}$ -чётна, а поле  $\mathcal{T}$ -нечётно. Эти результаты незаменимы при вычислении отклика спаренной системы на любые внешние поля.

**Дополнительная литература:** [68], [82], [97, 98] [100, 101], [103], [105], [106], [109]



Оказывается, что не волновая функция, а нечто иное, называемое матрицей плотности, может быть более полезным. Так что при небольшом усложнении уравнений (не сильном усложнении) я обращаюсь к матрице плотности.

*Р.Ф. Фейнман, [110]*

## Глава 17

### Матрица плотности

#### 17.1. Смешанные состояния и матрица плотности

До сих пор мы работали главным образом с *чистыми квантовыми состояниями*, описываемыми вектором состояния  $|\Psi\rangle$ . Это понятие соответствует специально приготовленной, например, как собственное состояние некоторого эрмитова оператора, изолированной квантовой системе, когда можно пренебречь её взаимодействием с окружением. Последнее возникает только в роли измерительной аппаратуры. Однако это лишь идеализация реальной ситуации. Например, мы несколько раз упоминали системы с тепловым возбуждением. В этом случае предполагается, что система находится в тепловом равновесии с нагревателем, *термостатом*, который поддерживает определенный уровень возбуждения системы. Другим важным обстоятельством является конечная точность аппаратуры, создающей начальное состояние.

Фактически описание системы как части большого комплекса является более общим, чем в терминах чистого квантового состояния. Такое описание становится неизбежным во всех случаях, когда мы имеем дело с частью динамических переменных и усредняем по ненаблюдаемым степеням свободы. Тогда, вместо чистого состояния, мы должны работать со *смешанными квантовыми состояниями*, описываемыми *матрицей плотности*  $\hat{\rho}$ , а не волновой функцией. Представим систему, состоящую из двух частей: собственно изучаемая система и ее окружение. Вторая часть, в частности, может быть набором переменных той же самой системы, который нам не интересен или недоступен для эксперимента, как это обычно имеет место в системах многих тел. Предполагая, что большая система как целое может считаться замкнутой и описываться волновой функцией  $|\Psi\rangle$ , мы вводим полный набор функций  $|k; \nu\rangle$ , где чистые состояния  $|k\rangle$  относятся к на-

шей подсистеме, в то время как  $|\nu\rangle$  характеризуют возможные состояния окружения.

Таким образом, произвольное состояние полной системы может быть представлено суперпозицией базисных состояний

$$|\Psi\rangle = \sum_{k\nu} C_{k;\nu} |k; \nu\rangle. \quad (17.1)$$

Амплитуды  $C_{k;\nu}$  могут зависеть от времени; они нормированы согласно

$$\sum_{k\nu} |C_{k;\nu}|^2 = 1. \quad (17.2)$$

Пусть  $\hat{A}$  — произвольный оператор, действующий только на переменные нашей подсистемы. Результаты его измерения описываются средними значениями  $\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$ . Матричные элементы  $\hat{A}$  диагональны по квантовым числам окружения

$$\langle k'; \nu' | \hat{A} | k; \nu \rangle = \delta_{\nu'\nu} A_{k'k}. \quad (17.3)$$

Поэтому среднее значение  $\hat{A}$  принимает вид

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{k'\nu' k\nu} C_{k';\nu'}^* C_{k;\nu} \langle k'; \nu' | \hat{A} | k; \nu \rangle = \sum_{k'k} A_{k'k} \sum_{\nu} C_{k;\nu} C_{k';\nu}^*. \quad (17.4)$$

Определим *матрицу плотности*  $\rho_{kk'}$ , действующую в гильбертовом пространстве исследуемой подсистемы, как результат *взятия следа* по переменным окружения

$$\rho_{kk'} = \sum_{\nu} C_{k;\nu} C_{k';\nu}^* \equiv \overline{C_k C_{k'}}, \quad (17.5)$$

где черта сверху означает «усреднение» по состояниям окружения. Матрица  $\hat{\rho}$  с элементами (17.5) определяет средние значения всех наблюдаемых величин:

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{k'k} A_{k'k} \rho_{kk'} = \sum_{k'} (A\rho)_{k'k'} \equiv \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}). \quad (17.6)$$

След  $\text{Tr}$  здесь и ниже относится только к состояниям нашей подсистемы. Следуя нормировке (17.2), матрица плотности тоже нормирована:

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1. \quad (17.7)$$

Функция распределения  $w(a)$  различных значений  $a$  оператора  $\hat{A}$  выражается как

$$w(a) = \text{Tr} \{ \delta(\hat{A} - a) \hat{\rho} \}. \quad (17.8)$$

Таким образом, матрица плотности предсказывает вероятности всех экспериментальных результатов в условиях неполной информации, когда система находится в смешанном состоянии, и её переменные *запутаны* с окружением.

## 17.2. Свойства матрицы плотности

Для *чистого* состояния (нет связи со средой) знание матрицы плотности эквивалентно знанию волновой функции. Если система находится в чистом состоянии  $|\alpha\rangle$  и мы используем произвольный базис  $|k\rangle$  в разложении (17.1) с коэффициентами  $C_k^\alpha$ , матрица плотности (17.5) этого состояния  $\rho^{(\alpha)}$  равна

$$\rho_{kk'}^{(\alpha)} = C_k^\alpha C_{k'}^{\alpha*} = \langle k|\alpha\rangle\langle\alpha|k'\rangle. \quad (17.9)$$

Это просто *проекционный оператор*, который выделяет из произвольного состояния  $|\Psi\rangle$  компоненту вдоль заданного вектора  $|\alpha\rangle$ :

$$\langle k|\hat{\rho}^{(\alpha)}|\Psi\rangle = \sum_{k'} \rho_{kk'}^{(\alpha)} \langle k'|\Psi\rangle = \langle k|\alpha\rangle \sum_{k'} \langle\alpha|k'\rangle \langle k'|\Psi\rangle = \langle k|\alpha\rangle \langle\alpha|\Psi\rangle. \quad (17.10)$$

Таким образом, для чистого состояния  $|\alpha\rangle$  оператор матрицы плотности — это *проектор*

$$\hat{\rho}^{(\alpha)} = |\alpha\rangle\langle\alpha|. \quad (17.11)$$

Его матрица может быть представлена как простое произведение (17.9).

### Задача 17.1

Доказать, что матрица плотности чистого состояния, уравнение (17.9), удовлетворяет определению (I.6.126) проекционного оператора

$$(\hat{\rho}^{(\alpha)})^2 = \hat{\rho}^{(\alpha)}. \quad (17.12)$$

Это означает, что собственные значения матрицы плотности чистого состояния равны единице для вектора этого состояния и нулю для любого ортогонального вектора.

В общем случае смешанного состояния оператор матрицы плотности эрмитов

$$\rho_{jk}^* = \sum_{\nu} C_{j;\nu}^* C_{k;\nu} = \rho_{kj} \quad \rightsquigarrow \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}. \quad (17.13)$$

Следовательно, собственные значения  $\hat{\rho}$  вещественны. Диагональные матричные элементы  $\hat{\rho}$  в любом базисе неотрицательны:

$$\rho_{kk} = \sum_{\nu} |C_{k;\nu}|^2 \geq 0. \quad (17.14)$$

Из (17.7) и инвариантности следа

$$\sum_k \rho_{kk} = 1 \quad (17.15)$$

числа  $\rho_{kk}$  располагаются между 0 и 1, достигая крайних значений для чистого состояния; в противоположность чистому состоянию (17.12), в общем случае  $\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1$ .

Явное представление матрицы плотности (17.5) зависит от выбора базиса. Матрицу плотности можно *диагонализировать*, её собственный базис  $|p\rangle$  иногда называют *пойнтер-базисом* или *каноническим базисом*. В собственном базисе

$$\rho_{pp'} = \rho_p \delta_{pp'}, \quad 0 \leq \rho_p \leq 1, \quad \sum_p \rho_p = 1. \quad (17.16)$$

В этом базисе оператор плотности является суммой проекционных операторов для базисных векторов  $|p\rangle$ :

$$\hat{\rho} = \sum_p \rho_p |p\rangle \langle p|. \quad (17.17)$$

Используя этот базис, мы можем наглядно интерпретировать собственные значения  $\rho_p$  как *вероятности* собственных состояний  $|p\rangle$  в ансамбле, образованном окружением. Эта интерпретация подтверждается вычислением среднего значения любой величины:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} (\hat{A} \hat{\rho}) = \sum_p \rho_p \langle p | \hat{A} | p \rangle. \quad (17.18)$$

Здесь мы имеем *двойное усреднение*, сначала по чистому квантовому состоянию  $|p\rangle$  канонического базиса, а затем по статистическому ансамблю, заселённому в соответствии с вероятностями  $\rho_p$ .

В качестве примера возьмем *одночастичную* матрицу плотности. В координатном представлении  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  нижние индексы  $kk'$  в определении (17.5) становятся непрерывными координатами, и среднее значение оператора  $\hat{A}$

равно

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \int d^3r d^3r' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \hat{A} | \mathbf{r} \rangle. \quad (17.19)$$

Для оператора  $\hat{A}(\mathbf{r})$ , который является функцией координат, его координатные матричные элементы  $A(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , и уравнение (17.19) содержит только диагональную часть  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  матрицы плотности, которая играет роль плотности вероятности  $w(\mathbf{r})$ :

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) A(\mathbf{r}). \quad (17.20)$$

В чистом состоянии  $\psi(\mathbf{r})$  мы имели бы  $w(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ .

### Задача 17.2

Найти связь между одночастичными матрицами плотности в импульсном и координатном представлениях и плотностью вероятности для зависящих от импульса операторов  $\hat{B}(\mathbf{p})$ .

#### Решение.

Используя преобразование (I.6.37), находим

$$\langle \mathbf{p} | \hat{\rho} | \mathbf{p}' \rangle \equiv \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \int d^3r d^3r' e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (17.21)$$

Обратное преобразование:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi\hbar)^6} e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}'). \quad (17.22)$$

Для любого оператора  $\hat{B}(\mathbf{p})$ , зависящего от импульса,

$$\langle \mathbf{p} | \hat{B}(\hat{\mathbf{p}}) | \mathbf{p}' \rangle = B(\mathbf{p})(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (17.23)$$

и среднее значение равно

$$\langle \hat{B} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}) B(\mathbf{p}), \quad (17.24)$$

т. е. импульсная плотность вероятности равна

$$w(\mathbf{p}) = \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}) = \int d^3r d^3r' e^{(i/\hbar)\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} w(\mathbf{p}) = 1. \quad (17.25)$$

**Задача 17.3**

Доказать, что в любом базисе матричные элементы  $\hat{\rho}$  удовлетворяют неравенству

$$\rho_{kk}\rho_{ll} \geq |\rho_{kl}|^2, \quad (17.26)$$

т. е. все миноры матрицы плотности положительно определены.

**Решение.**

Доказательство, которое можно найти в учебниках по алгебре, проводится следующим образом. При  $k = l$  и размерности 2 равенство очевидно. Возьмем  $k \neq l$  и размерность пространства  $\geq 3$ . Для любого эрмитова оператора  $\hat{Q}$  и любой матрицы плотности среднее значение  $\langle \hat{Q}^2 \rangle > 0$ . Поэтому

$$\langle \hat{Q}^2 \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{Q}^2) = \sum_{ijn} \rho_{ij} Q_{jn} Q_{ni} = \sum_{ijn} \rho_{ij} Q_{jn} Q_{in}^* \geq 0. \quad (17.27)$$

Здесь  $\hat{Q}$  произволен, и мы можем выбрать оператор, который имеет только ненулевые матричные элементы  $Q_{kn} = Q_{nk}^* \equiv x$  и  $Q_{ln} = Q_{nl}^* \equiv y$  для переходов от  $|k\rangle$  и  $|l\rangle$  к некоторому состоянию  $|n\rangle$ , где  $n \neq k, l$ . Соберем все ненулевые вклады в сумме (17.27):

$$\rho_{kk}|x|^2 + \rho_{ll}|y|^2 + \rho_{kl}xy^* + \rho_{lk}x^*y + \rho_{nn}(|x|^2 + |y|^2) \geq 0. \quad (17.28)$$

Поскольку это должно удовлетворяться для любых  $x, y$  и  $\rho_{nn}$ , сумма первых четырех членов в (17.28) должна быть  $\geq 0$ , т. е. билинейная форма элементов  $\rho$  в  $kl$ -подпространстве неотрицательна, и её детерминант  $\geq 0$ , в соответствии с (17.26).

Недиагональные элементы матрицы плотности связаны с явлениями *интерференции*. Будем повторять измерение величины  $\hat{A}$  в смешанном состоянии, описываемом матрицей плотности  $\rho_{kk'}$ . Каждое измерение порождает одно из собственных состояний  $|a\rangle$  этого оператора. В результате мы получим распределение вероятностей  $w(a)$ , уравнение (17.8), поэтому конечная матрица плотности диагональна в базисе собственных функций  $\hat{A}$ :

$$\hat{\rho}' = \sum_a w(a) |a\rangle \langle a|. \quad (17.29)$$

В терминах исходного базиса найденное распределение может быть записано как

$$w(a) = \langle a | \hat{\rho} | a \rangle = \sum_{kk'} \langle a | k \rangle \rho_{kk'} \langle k' | a \rangle, \quad (17.30)$$

что содержит некогерентную сумму и интерференционные члены:

$$w(a) = \sum_k \rho_{kk} |\langle a|k\rangle|^2 + \sum_{kk' (k \neq k')} \rho_{kk'} \langle a|k\rangle \langle a|k'\rangle^*. \quad (17.31)$$

Исходные недиагональные элементы  $\rho_{kk'}$ ,  $k \neq k'$ , ответственны за потенциальную возможность когерентной интерференции различных компонент начального состояния. Степень когерентности, или *контрастность* интерференционной картины, можно оценить с помощью специальной величины

$$D_{kk'} = \frac{\rho_{kk'}}{\sqrt{\rho_{kk} \rho_{k'k'}}}. \quad (17.32)$$

В соответствии с результатом (17.26) задачи 17.3  $|D_{kk'}| \leq 1$  и *максимальная когерентность*  $D_{kk'} = 1$  достигается для чистых состояний, как видно из (17.9).

### 17.3. Тепловое равновесие

Как показано в статистической механике, тепловое равновесие с термостатом при температуре  $T$  создает *каноническую* матрицу плотности системы

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\hat{H}/T}, \quad Z = \text{Tr} \left( e^{-\hat{H}/T} \right), \quad (17.33)$$

где  $\hat{H}$  — гамильтониан системы, контактирующей с большим тепловым резервуаром, а температура выражена в энергетических единицах. Очевидно, что собственный базис здесь совпадает с базисом стационарных состояний гамильтониана.

При тепловом равновесии, описываемом ансамблем (17.33), вероятность заселения определённого стационарного состояния  $|n\rangle$  зависит только от энергии  $E_n$ , безотносительно ко всем другим характеристикам ансамбля. Все микроскопические состояния в узком энергетическом окне входят с равными вероятностями. Это физически возможно, только если все эти состояния имеют практически идентичные макроскопические свойства. Лежащий в основе механизм установления равновесия обеспечивается смешиванием квантовых состояний в области большой плотности уровней вследствие взаимодействия с термостатом (или между разными частями системы). Это смешивание приводит к *квантовому хаосу*, наблюдаемому в локальных спектральных флуктуациях и корреляциях (гл. 18).

Статистическая сумма

$$Z(T) = \sum_n e^{-\beta E_n} = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}), \quad \beta = \frac{1}{T}, \quad (17.34)$$

которая формально входит в качестве нормирующего множителя для матрицы плотности, играет важную двойственную роль. Во-первых, она устанавливает связь внутренней структуры системы, воплощённой в ее энергетическом спектре  $E_n$ , с макроскопическими наблюдаемыми термодинамическими величинами, удобно выражаемыми в терминах *свободной энергии*:

$$F(T) = -T \ln Z, \quad \hat{\rho} = e^{\beta(F - \hat{H})}. \quad (17.35)$$

Система в тепловом равновесии не имеет определенной энергии; ее распределение дается  $\rho_n = (1/Z) \exp(-\beta E_n)$ ; средняя энергия может быть найдена как

$$\langle E \rangle = \text{Tr}(\hat{H} \hat{\rho}) = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n}. \quad (17.36)$$

С другой стороны, знание статистической суммы (17.34) как функции температуры позволяет извлечь *плотность уровней* системы. В самом деле, статистическая сумма — это *преобразование Лапласа* плотности уровней:

$$Z(\beta) = \text{Tr} \left\{ \int dE e^{-\beta E} \delta(E - \hat{H}) \right\} = \int dE e^{-\beta E} \nu_{\text{level}}(E). \quad (17.37)$$

Плотность уровней, в свою очередь, можно найти обратным преобразованием Лапласа статистической суммы, если последняя известна в широком диапазоне температур.

#### Задача 17.4

Найти среднюю энергию гармонического осциллятора при температуре  $T$ .

#### Решение.

С известным энергетическим спектром  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  мы суммируем геометрическую прогрессию и находим

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (n + 1/2)} = \frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{2}{\sinh(\beta \hbar \omega)}. \quad (17.38)$$

Средняя энергия определяется выражением (17.36):

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right) = \hbar\omega \coth \left( \frac{\hbar\omega}{2T} \right). \quad (17.39)$$

Это *распределение Планка*, которое послужило зародышем квантовой механики (гл. I.1). Мы интерпретируем этот ответ как результат комбинирования *квантовых флуктуаций* (энергия нулевых колебаний  $\hbar\omega/2$ ) с *тепловыми флуктуациями*, которые создают среднее число  $\langle n \rangle$  квантов теплового возбуждения

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \langle n \rangle \right), \quad \langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \quad (17.40)$$

Поскольку средние значения кинетической и потенциальной энергий гармонического осциллятора равны в каждом стационарном состоянии, этот аналог классического *равнораспределения* также справедлив для равновесного ансамбля. Следовательно, среднеквадратичное смещение от равновесного положения может быть найдено как

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{m\omega^2} \langle E \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \coth \left( \frac{\hbar\omega}{2T} \right). \quad (17.41)$$

### Задача 17.5

Найти матрицу плотности в координатном представлении  $\rho(x, x')$  для гармонического осциллятора при температуре  $T$ .

#### Решение.

Матрица плотности  $\rho(x, x')$  задаётся выражением

$$\langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} \langle n | x' \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-\beta E_n}. \quad (17.42)$$

Здесь сумма совпадает с пропагатором  $G(x, x'; t - t')$ , уравнение (I.3.37), продолженным в *комплексные времена*

$$t - t' \Rightarrow -i\hbar\beta. \quad (17.43)$$

Пропагатор при вещественном времени для гармонического осциллятора был найден в (I.11.65). Подстановка (17.43) вместе с нормировкой (17.38)

приводит к

$$\rho(x, x') = \sqrt{\frac{m\omega y}{\pi\hbar}} e^{-(m\omega/4\hbar)[(x+x')^2 y + (x-x')^2/y]}, \quad y = \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right). \quad (17.44)$$

Диагональные элементы матрицы плотности  $x' = x$  могут интерпретироваться как функция распределения  $w(x)$ , уравнение (17.20), координаты осциллятора, взаимодействующего с тепловым резервуаром,

$$w(x) = \rho(x, x) = \sqrt{\frac{m\omega y}{\pi\hbar}} e^{-(m\omega/h)y x^2}, \quad \int dx w(x) = 1. \quad (17.45)$$

Это распределение Гаусса с дисперсией  $\langle x^2 \rangle$ , найденной в (17.41). Отметим разницу между классическим случаем, когда  $y = \tanh \alpha \rightarrow \alpha$ , постоянная Планка не входит в ответ, и мы получаем результат больцмановской статистики

$$w(x) \Rightarrow \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi T}} e^{-m\omega^2 x^2/2T}, \quad \alpha \equiv \frac{\hbar\omega}{2T} \ll 1, \quad (17.46)$$

и квантовым пределом  $\alpha \gg 1$ , когда  $y \rightarrow 1$ , и мы восстанавливаем неопределённость координаты в основном состоянии осциллятора, уравнение (I.11.16):

$$P(x) = |\psi_0(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-m\omega x^2/\hbar}. \quad (17.47)$$

Равновесный канонический ансамбль (17.33) может быть обобщён для случаев, когда другие макроскопические величины, кроме энергии, даны их средними значениями, хотя их микроскопические значения флуктуируют вследствие взаимодействия с термостатом. Чтобы зафиксировать наблюдаемые средние значения, вводят, подобно температуре, которая определяет среднюю энергию, аналогичные *интенсивные* величины (локальные, растущие пропорционально объёму или числу частиц). Мы используем *химический потенциал*  $\mu$ , когда полное число частиц  $N$  флуктуирует вокруг его среднего значения:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z(\mu, T)} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}, \quad Z(\mu, T) = \text{Tr}\left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}\right), \quad (17.48)$$

где след берется по всем собственным состояниям с разными числами частиц. Если нужно зафиксировать средний угловой момент системы  $\mathbf{J}$ ,

мы вводим *угловую скорость*  $\boldsymbol{\Omega}$ :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\Omega}, T)} e^{-\beta[\hat{H} - (\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{j}})]}, \quad Z(\boldsymbol{\Omega}, T) = \text{Tr} \left( e^{-\beta[\hat{H} - (\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{j}})]} \right); \quad (17.49)$$

в случае полного импульса  $\mathbf{P}$  мы добавляем в экспоненте  $-(\mathbf{V} \cdot \mathbf{P})$ , где  $\mathbf{V}$  играет роль скорости системы как целого.

## 17.4. Поляризациянная матрица плотности

Спиновое состояние системы часто задаётся в терминах матрицы плотности. Будучи приготовленным, например, комбинацией магнитных полей или полученным в результате химической или ядерной реакции, оно может быть некогерентной смесью различных возможностей.

Рассмотрим систему, — «частица» со спином  $j$  (её полный угловой момент), который приготовлен в состоянии, характеризуемом матрицей плотности  $\rho_{mm'}$ , где  $m$  и  $m'$  возможные проекции  $j_z$  на ось квантования. Для чистого состояния с фиксированной проекцией  $j_z = m_0$ , эта матрица плотности была бы

$$\rho_{mm'} = \delta_{mm_0} \delta_{m'm_0}. \quad (17.50)$$

В противоположном случае *неполяризованной* частицы все проекции равновероятны:

$$\rho_{mm'} = \frac{\delta_{mm'}}{2j + 1}. \quad (17.51)$$

Соответственно, поляризация частицы задается в этих крайних случаях вектором

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \text{Tr} (\hat{\mathbf{j}} \hat{\rho}) = \begin{cases} \mathbf{e}_z m_0, & \text{фиксированная проекция,} \\ 0, & \text{неполяризованная} \end{cases} \quad (17.52)$$

### Задача 17.6

Определить спиновую матрицу плотности для частицы 2 со спином  $j_2$ , связанной с ненаблюдаемой частицей 1 со спином  $j_1$  в состоянии  $|JM\rangle$  с фиксированными квантовыми числами полного углового момента и его проекции.

**Решение.**

Полная система описывается смешанной (связанной) волновой функцией

$$|JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (17.53)$$

По определению (17.5) находим

$$\rho_{m_2 m_2'}^{(JM)} = \sum_{m_1} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} C_{j_1 m_1 j_2 m_2'}^{JM} = \delta_{m_2 m_2'} (C_{j_1 M - m_2 j_2 m_2}^{JM})^2. \quad (17.54)$$

Матрица плотности диагональна вследствие сохранения проекции углового момента, но диагональные матричные элементы зависят от  $m_2$ . Только для  $J = M = 0$  матрица плотности неполяризована

$$\rho_{m_1 m_2}^{(00)} = \frac{\delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}}{2j_2 + 1}. \quad (17.55)$$

Если мы интересуемся состоянием спина, ориентированного вдоль оси, которая не совпадает с исходной осью, использованной для определения матрицы плотности, то нужно сделать поворот для совмещения этих осей. Если мы вращаем *обе* оси, исходную, использованную для приготовления системы, и другую ось, нужную для измерения или вторичного эксперимента, на один и тот же угол, результат не должен измениться. Следовательно, преобразование матрицы плотности  $\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}'$  должно быть обратным по отношению к преобразованию операторов  $\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1}$ :

$$\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}') \equiv \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1}) = \text{Tr}(\hat{U}^{-1} \hat{\rho} \hat{U} \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{\rho}' \hat{A}). \quad (17.56)$$

Мы использовали здесь циклическую инвариантность оператора следа, которая показывает, что переход  $|jm\rangle \rightarrow |jm'\rangle$  в операторе под знаком следа сопровождается обратным переходом  $|jm'\rangle \rightarrow |jm\rangle$  для оператора  $\hat{\rho}$ .

Полный набор операторов, действующих в пространстве  $|jm\rangle$ , состоит из тензорных операторов  $T_{\lambda\mu}$ , которые могут связывать отдельные состояния в этом пространстве. Этот набор ограничен правилами векторной связи (гл. II.6 и II.7),  $0 \leq \lambda \leq 2j$ , в то время как проекции  $m, m'$  и  $\mu$  должны удовлетворять обычному алгебраическому закону сохранения,  $m' + \mu = m$ . Следовательно, поляризационная матрица плотности всегда может быть представлена суперпозицией матричных элементов разрешенных тензорных

операторов

$$\rho_{mm'} = \sum_{\lambda\mu} (-)^{j-m'} C_{j-m' j m}^{\lambda\mu} T_{\lambda\mu}, \quad (17.57)$$

где коэффициенты Клебша–Гордана (ККГ) гарантируют корректные правила отбора (некоторые авторы используют в этом определении  $3j$ -символы). Поляризациянные моменты, или спин-тензоры  $T_{\lambda\mu}$ , полностью характеризуют матрицу плотности. Фаза в (17.57) соответствует правилу обращения времени, обсуждавшемуся в разд. II.7.6, поскольку проекция  $m'$  уничтожается.

### Задача 17.7

Определить поляризациянные моменты для неполяризованного состояния.

#### Решение.

В силу ортогональности ККГ мы можем разрешить уравнение (17.57) для поляризациянных моментов:

$$T_{\lambda\mu} = \sum_{mm'} (-)^{j-m'} C_{j-m' j m}^{\lambda\mu} \rho_{mm'}. \quad (17.58)$$

Матрица плотности неполяризованного состояния определяется уравнением (17.51), поэтому

$$T_{\lambda\mu} = \frac{1}{2j+1} \sum_m (-)^{j-m} C_{j-m j m}^{\lambda\mu}. \quad (17.59)$$

Как следует из задачи II.7.5,

$$C_{j-m j m}^{00} = \frac{(-)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}. \quad (17.60)$$

Снова используя свойство ортогональности, находим

$$T_{\lambda\mu} = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_m C_{j-m j m}^{00} C_{j-m j m}^{\lambda\mu} = \frac{\delta_{\lambda 0} \delta_{\mu 0}}{\sqrt{2j+1}}, \quad (17.61)$$

т. е. единственный скалярный момент  $T_{00}$  описывает неполяризованное состояние.

В общем случае поляризованное состояние объекта со спином  $j$  характеризуется или  $(2j+1)^2$  элементами эрмитовой матрицы плотности ( $(2j+1)$  вещественных диагональных элементов и  $(2j+1)2j$  параметров, возникающих из взаимно комплексно сопряжённых недиагональных элементов), или,

что эквивалентно,  $(2j + 1)^2$  спин-тензорами  $T_{\lambda\mu}$ , ограниченными правилами треугольника.

### Задача 17.8

Построить спин-тензоры для частицы со спином  $1/2$  и связать их со средними значениями компонент спина.

#### Решение.

$(2s + 1)^2 = 4$  разрешенных спин-тензоров содержат скаляр  $T_{00}$  и три компоненты вектора  $T_{1\mu}$ . В соответствии с теоремой Вигнера–Эккарта, разд. I.12.7, векторная часть пропорциональна матричным элементам оператора углового момента, в этом случае спина  $\mathbf{s}$ , или матрицам Паули  $\boldsymbol{\sigma}$ . В самом деле, мы знаем, что  $1$  и  $\boldsymbol{\sigma}$  образуют полный набор матриц  $2 \times 2$ . Разложение (17.57) принимает вид

$$\hat{\rho} = A + (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (17.62)$$

а коэффициенты находятся из задачи II.5.5

$$A = \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\rho} = \frac{1}{2}, \quad \mathbf{B} = \frac{1}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \hat{\rho}) = \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle. \quad (17.63)$$

В результате общая матрица плотности спина  $1/2$  может быть записана как

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left( 1 + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \boldsymbol{\sigma} \right). \quad (17.64)$$

Скалярная часть  $A$  соответствует отсутствию поляризации, уравнение (17.61),

$$T_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (17.65)$$

в то время как векторная часть определяет *вектор поляризации* (2.87),

$$\mathbf{P} = \text{tr}(\hat{\rho} \boldsymbol{\sigma}) \equiv \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad (17.66)$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left( 1 + (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}. \quad (17.67)$$

Векторный поляризационный момент  $T_{1\mu}$  пропорционален среднему значению соответствующей сферической компоненты спина,

$$T_{1\mu} = \alpha \langle \sigma_\mu \rangle = \alpha P_\mu. \quad (17.68)$$

Коэффициент  $\alpha$  может быть найден, например, из  $z$ -проекции,  $\mu = 0$ , поскольку мы знаем соответствующие ККГ из (II.7.20):

$$T_{10} = \alpha P_z = \sum_{m=\pm 1/2} C_{1/2-m \ 1/2m}^{10} (-)^{1/2-m} \frac{1}{2} (\sigma_z)_{mm} \langle \sigma_z \rangle \rightsquigarrow \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (17.69)$$

### Задача 17.9

Определить векторный спин-тензор  $T_{1\mu}$  для частицы с произвольным спином  $j$  в терминах средних значений компонент  $\mathbf{j}$ .

#### Решение.

Спин-тензор определяется как

$$T_{1\mu} = \sum_{mm'} (-)^{j-m'} C_{j-m' \ jm}^{1\mu} \rho_{mm'}. \quad (17.70)$$

По теореме Вигнера–Эккарта, матричные элементы углового момента могут быть выражены через те же ККГ

$$\langle m' | \hat{j}_\mu | m \rangle = (-)^{j-m'} C_{j-m' \ jm}^{1\mu} X_j, \quad (17.71)$$

где  $X_j$  относится к приведенному матричному элементу. Следовательно,

$$T_{1\mu} = \frac{1}{X_j} \sum_{mm'} (j_\mu)_{m'm'} \rho_{mm'} = \frac{1}{X_j} \langle \hat{j}_\mu \rangle. \quad (17.72)$$

Остается определить коэффициент  $X_j$ . Это можно сделать, вычисляя  $\langle \hat{\mathbf{j}}^2 \rangle = j(j+1)$ . Используя (17.71) и ортонормированность ККГ, получим

$$X_j^2 = \frac{1}{3} j(j+1)(2j+1), \quad (17.73)$$

и наконец

$$T_{1\mu} = \sqrt{\frac{3}{j(j+1)(2j+1)}} \langle \hat{j}_\mu \rangle. \quad (17.74)$$

Для спина  $1/2$  этот результат совпадает с (17.69), если вспомнить, что  $\mathbf{s} = (1/2)\boldsymbol{\sigma}$ .

### 17.5. Приложение к рассеянию

На практике состояние пучка частиц *смешанное*, а не чистое. Формализм матрицы плотности полезен для описания как начального состояния, так и продуктов взаимодействия. Мы обсуждали рассеяние частично поляризованного пучка частиц со спином  $1/2$  в разд. 2.10. Здесь мы наметим более общий подход.

Рассмотрим процесс рассеяния с сечением, определённым квадратом амплитуды  $f$ . В общем случае амплитуда является оператором (зависящим от углов рассеяния), который преобразует начальные внутренние переменные, включая спиновые, к их конечным значениям. Пусть начальное состояние описывается матрицей плотности (например, по отношению к спиновым переменным)  $\rho_{kk'}$ . Каждое чистое начальное состояние будет преобразовано оператором рассеяния в суперпозицию конечных состояний. Начальная амплитуда  $C_k$  чистого состояния  $|k\rangle$  порождает суперпозицию конечных состояний  $|m\rangle$ , и амплитуда вероятности нахождения состояния  $|m\rangle$  даётся матричным элементом оператора рассеяния  $C'_m = \sum_k f_{mk} C_k$ .

Переходя от чистого состояния к ансамблю экспериментов с неполной информацией, мы получаем преобразование матрицы плотности (черта сверху означает усреднение по ансамблю):

$$\rho'_{mm'} = \overline{C'_m C'^*_{m'}} = \overline{\sum_k f_{mk} C_k \left( \sum_{k'} f_{m'k'} C_{k'} \right)^*} = \sum_{kk'} f_{mk} \rho_{kk'} f^*_{m'k'} = (\hat{f} \hat{\rho} \hat{f}^\dagger)_{mm'}, \quad (17.75)$$

или, в операторной форме,

$$\hat{\rho}' = \hat{f} \hat{\rho} \hat{f}^\dagger. \quad (17.76)$$

Дифференциальное сечение процесса с регистрацией всех внутренних состояний даётся выражением (ср. с разд. 2.10)

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \sum_m |C'_m|^2 = \text{Tr} \hat{\rho}' = \text{Tr}(\hat{f} \hat{\rho} \hat{f}^\dagger). \quad (17.77)$$

Здесь мы предполагаем, что начальная матрица плотности нормирована, как в уравнениях (17.7) и (17.15). Для неполяризованных частиц спина  $s$  начальная матрица плотности (17.51) определяет

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{2s+1} \text{Tr}(\hat{f} \hat{f}^\dagger), \quad (17.78)$$

т. е. простое усреднение по возможным состояниям спина.

Среднее значение  $Q' \equiv \langle Q \rangle'$  любой наблюдаемой  $\hat{Q}$  после процесса рассеяния вычисляется с помощью конечной матрицы плотности (17.76). Поскольку  $\hat{f}$  не является унитарным оператором,  $\hat{\rho}'$  нормирован дифференциальным сечением (17.77). Следовательно, средние значения выражаются как

$$Q' = \frac{\text{Tr}(\hat{Q}\hat{\rho}')}{d\sigma/d\Omega} = \frac{\text{Tr}(\hat{Q}\hat{f}\hat{\rho}\hat{f}^\dagger)}{d\sigma/d\Omega}. \quad (17.79)$$

В частности, поляризация  $\mathbf{P}'$  рассеянных частиц определяется как

$$\mathbf{P}' = \frac{\text{Tr}(\hat{\mathbf{s}}\hat{f}\hat{\rho}\hat{f}^\dagger)}{\text{Tr}(\hat{f}\hat{\rho}\hat{f}^\dagger)}. \quad (17.80)$$

### Задача 17.10

Частица со спином  $s$  рассеивается на ядре со спином  $J$ . Предполагая, что исходная мишень не поляризована, в то время как исходный пучок имеет поляризацию  $\mathbf{P}$  (и нет высших поляризационных моментов), выразить дифференциальное сечение и конечную поляризацию частиц в упругом рассеянии, описываемом амплитудой  $\hat{F}(\theta)$ .

#### Решение.

Начальная матрица плотности  $\rho^{(p)}$  налетающего пучка содержит только  $T_{00}$  и  $T_{1\mu}$  спиновые моменты:

$$T_{00} = \frac{1}{\sqrt{2s+1}} \quad (17.81)$$

(нормировка) и (см. уравнение (17.74))

$$\mathbf{T} = \sqrt{\frac{3}{s(s+1)(2s+1)}} \mathbf{P}. \quad (17.82)$$

Это определяет начальную матрицу плотности (17.57)

$$\rho_{mm'}^{(p)} = \frac{\delta_{mm'}}{2s+1} + \sqrt{\frac{3}{s(s+1)(2s+1)}} \sum_{\mu} (-)^{s-m'} C_{s-m' \ sm}^{1\mu} P_{\mu}, \quad (17.83)$$

или, в силу (17.71) и (17.73),

$$\rho_{mm'}^{(p)} = \frac{1}{2s+1} \left\{ \delta_{mm'} + \frac{3}{s(s+1)} (\mathbf{s}_{mm'} \cdot \mathbf{P}) \right\}. \quad (17.84)$$

Это выражение не предполагает какой-либо особой геометрии; вектор поляризации имеет произвольное направление, безотносительно к оси квантования. Для спина  $1/2$  мы приходим к результату (17.64), использованному в разд. 2.10:

$$\rho_{mm'}^{(s=1/2)} = \frac{1}{2} \delta_{mm'} + (\vec{\sigma}_{mm'} \cdot \mathbf{P}), \quad (17.85)$$

в то время как высшие компоненты матрицы плотности отсутствуют.

Принимая во внимание также неполяризованную матрицу плотности мишени

$$\rho_{MM'}^{(t)} = \frac{\delta_{MM'}}{2J+1} \quad (17.86)$$

и вводя оператор рассеяния  $\hat{F}$ , который, в отличие от  $\hat{f}$ , действует также на переменные мишени, мы получим дифференциальное сечение, усредненное по состояниям мишени

$$\frac{d\sigma}{do} = \text{Tr}(\hat{F}\hat{F}^\dagger) = \frac{1}{(2s+1)(2J+1)} \left\{ \text{Tr}(\hat{F}\hat{F}^\dagger) + \frac{3}{s(s+1)} \left( \text{Tr}(\hat{F}\hat{\mathbf{s}}\hat{F}^\dagger) \cdot \mathbf{P} \right) \right\}. \quad (17.87)$$

В терминах неполяризованного сечения

$$\left( \frac{d\sigma}{do} \right)_0 = \frac{1}{(2s+1)(2J+1)} \text{Tr}(\hat{F}\hat{F}^\dagger) \quad (17.88)$$

мы получим

$$\frac{d\sigma}{do} = \left( \frac{d\sigma}{do} \right)_0 \left\{ 1 + \frac{3}{s(s+1)} \mathbf{P} \cdot \frac{\text{Tr}(\hat{F}\hat{\mathbf{s}}\hat{F}^\dagger)}{\text{Tr}(\hat{F}\hat{F}^\dagger)} \right\}. \quad (17.89)$$

Для конечной поляризации находим

$$P'_i = \frac{\text{Tr}(\hat{s}_i\hat{F}\hat{F}^\dagger) + [3/(s(s+1))] \mathbf{P} \cdot \text{Tr}(\hat{s}_i\hat{F}\hat{\mathbf{s}}\hat{F}^\dagger)}{\text{Tr}(\hat{F}\hat{F}^\dagger) + [3/(s(s+1))] \mathbf{P} \cdot \text{Tr}(\hat{F}\hat{\mathbf{s}}\hat{F}^\dagger)}. \quad (17.90)$$

Поляризация исходно неполяризованного пучка может быть использована для вторичного рассеяния, что приводит к азимутальной асимметрии вторично рассеянных частиц по отношению к их волновому вектору  $\mathbf{k}'$ , полученному после первичного рассеяния.

## 17.6. Энтропия ансамбля

Квантовый ансамбль, определённый матрицей плотности  $\hat{\rho}$ , может характеризоваться *энтропией ансамбля*

$$S[\rho] = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}). \quad (17.91)$$

В противоположность информационной энтропии, разд. 18.5, энтропия (17.91) даётся следом, т. е. она инвариантна при унитарных преобразованиях базиса. В собственном базисе (17.17) мы можем вычислить энтропию как

$$S = -\sum_p \rho_p \ln \rho_p. \quad (17.92)$$

Это показывает, что энтропия чистого состояния  $\rho_p = \delta_{pp_0}$  равна нулю. Любое смешанное состояние имеет бóльшую энтропию — оно несёт *меньшую информацию*.

Определение энтропии может быть применено к равновесному тепловому ансамблю. Взяв производную по свободной энергии (17.35), находим

$$\langle E \rangle = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} = -T \frac{\partial F}{\partial T} + F \equiv F + TS, \quad (17.93)$$

где *термодинамическая энтропия* определяется как

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}. \quad (17.94)$$

Используя явный вид (17.33) канонической матрицы плотности, мы непосредственно убеждаемся, что термодинамическая энтропия (17.94) совпадает с общим выражением для энтропии ансамбля (17.92):

$$S = -\sum_n \rho_n \ln \rho_n, \quad \rho_n = \frac{1}{Z} e^{-E_n/T}. \quad (17.95)$$

### Задача 17.11

Найти энтропию ансамбля спинов  $1/2$ , определённого вектором поляризации  $\mathbf{P}$ .

#### Решение.

Собственные значения поляризационной матрицы плотности (17.64)

$$\rho_{\pm} = \frac{1 \pm P}{2}, \quad P = |\mathbf{P}| \quad (17.96)$$

имеют простой смысл вероятностей нахождения частицы со спином вверх или вниз относительно направления поляризации  $\mathbf{P}$ . Для энтропии ансамбля находим

$$S = -\frac{1+P}{2} \ln \frac{1+P}{2} - \frac{1-P}{2} \ln \frac{1-P}{2}. \quad (17.97)$$

Чистое состояние характеризуется волновой функцией; тогда поляризация  $\mathbf{P}$  является единичным вектором  $P = 1$ , и энтропия исчезает.

### Задача 17.12

*Энтропия смешивания* (рис. 17.1). Два равных объема  $V$  наполнены газом из  $N$  тождественных частиц со спином  $1/2$  в каждом объеме; температура и давление одинаковы в обеих частях. Частицы в двух частях находятся в чистых состояниях  $\psi_1$  и  $\psi_2$  (вообще говоря, не ортогональных). Найти энтропию равновесного состояния после того, как перегородка между объемами была убрана, и газы перемешались из-за диффузии.

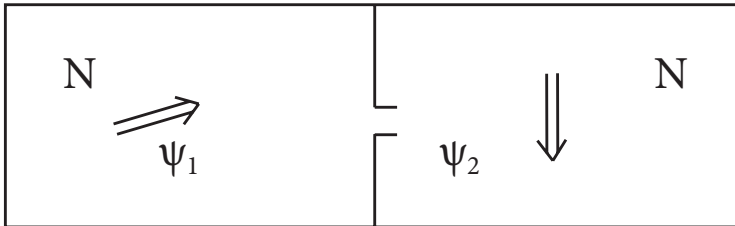


Рис. 17.1. Начальное состояние двух газов

### Решение.

Любое состояние частицы со спином  $1/2$  поляризовано, поэтому начальная поляризация газов можно задать единичными векторами  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$ . Вначале части системы описываются матрицами плотности (17.96):

$$\hat{\rho}_{1,2} = \frac{1 + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{1,2})}{2}. \quad (17.98)$$

Конечная поляризация равна

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2} (\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2). \quad (17.99)$$

Это состояние характеризуется матрицей плотности

$$\hat{\rho} = \frac{1 + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})}{2} = \frac{\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2}{2}. \quad (17.100)$$

Энтропия чистого состояния равна нулю, так что изменение энтропии равно её конечному значению

$$S = -2N \operatorname{Tr} \left\{ \frac{\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2}{2} \ln \frac{\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2}{2} \right\}. \quad (17.101)$$

Результат может быть удобно представлен в терминах перекрытия исходных волновых функций (II.5.35), равного

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \frac{1}{2} [1 + (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)] = \frac{1 + \cos \gamma}{2} = \cos^2(\gamma/2), \quad (17.102)$$

где  $\gamma$  — угол между направлениями поляризаций:

$$P^2 = \cos^2 \left( \frac{\gamma}{2} \right) = \operatorname{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2). \quad (17.103)$$

Тогда уравнение (17.101) показывает, что энтропия возрастает после перемешивания на величину

$$S = -2N \left\{ \frac{1 + \cos(\gamma/2)}{2} \ln \frac{1 + \cos(\gamma/2)}{2} + \frac{1 - \cos(\gamma/2)}{2} \ln \frac{1 - \cos(\gamma/2)}{2} \right\}. \quad (17.104)$$

Для ортогональных спиновых состояний  $\gamma = \pi$ ,  $\cos(\gamma/2) = 0$  и

$$S = 2N \ln 2, \quad (17.105)$$

в то время как для идентичных поляризаций  $\gamma = 0$

$$S = 0. \quad (17.106)$$

Для классических газов мы имеем только эти два крайних результата, приводящих к *парадоксу Гиббса*: разрывность энтропии смешивания, когда мы идем от *разных* газов, где соответствующая энтропия получает скачок  $\ln 2$  на частицу как результат удвоения доступного объема, к *тождественным* газам без изменения энтропии. В квантовом случае мы не можем изменить дискретных квантовых чисел, таких как заряды, которые различают типы частиц. Но мы можем непрерывно изменять направление поляризации и

таким путем исследовать все гильбертово пространство. Это восстанавливает непрерывность, и энтропия перемешивания может принимать любое промежуточное (всегда неотрицательное) значение. Такое же заключение справедливо для любой пары начальных волновых функций  $\psi_1, \psi_2$ , которые отличаются непрерывным изменением внутреннего параметра [111].

## 17.7. Эволюция матрицы плотности

Эволюция во времени чистого состояния управляется гамильтонианом системы через уравнение Шрёдингера. Динамика смешанных состояний должна описываться в терминах матрицы плотности. Уравнение движения для матрицы плотности замкнутой системы также определяется ее гамильтонианом  $\hat{H}$ .

Используя полный ортонормированный набор  $|k\rangle$  не зависящих от времени состояний замкнутой системы, представим любое чистое состояние (17.1) как суперпозицию

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k C_k(t)|k\rangle. \quad (17.107)$$

Здесь, в отличие от гл. П.10, состояния  $|k\rangle$ , вообще говоря, не являются собственными состояниями гамильтониана. Состояние (17.107) развивается во времени согласно

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = i\hbar \sum_k \dot{C}_k |k\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle = \sum_{kl} C_k H_{lk} |l\rangle. \quad (17.108)$$

Это эквивалентно системе уравнений для амплитуд  $C_k$  и их комплексно сопряжённых  $C_k^*$

$$i\hbar \dot{C}_l = \sum_k C_k H_{lk}, \quad -i\hbar \dot{C}_n^* = \sum_k C_k^* H_{nk}^*. \quad (17.109)$$

Поэтому матрица плотности системы

$$\rho_{ln} = C_l C_n^* \quad (17.110)$$

должна быть решением уравнения

$$i\hbar \dot{\rho}_{ln} = \sum_k (H_{lk} \rho_{kn} - \rho_{lk} H_{nk}^*). \quad (17.111)$$

Вследствие эрмитовости гамильтониана  $H_{nk}^* = H_{kn}$  уравнение (17.111) может быть написано в операторной форме

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (17.112)$$

(уравнение фон Неймана — квантовый аналог уравнения Лиувилля классической механики).

С гамильтонианом, не зависящим от времени, формальное решение уравнения (17.112) есть

$$\hat{\rho}(t) = e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} \hat{\rho}(0) e^{(i/\hbar)\hat{H}t}. \quad (17.113)$$

Уравнения (17.112) и (17.113) отличаются знаком времени от соответствующих выражений в картине Гейзенберга (разд. I.7.5). Так и должно быть, потому что только при этом различные картины эквивалентны (ср. с похожими аргументами, относящимися к вращению, уравнение (17.56)). В самом деле, среднее значение не зависящего от времени оператора  $\hat{A}$  с матрицей плотности, эволюционирующей согласно уравнению (17.112), задаётся выражением

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \text{Tr} \left( \hat{A} \hat{\rho}(t) \right) = \text{Tr} \left( \hat{A} e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} \hat{\rho}(0) e^{(i/\hbar)\hat{H}t} \right). \quad (17.114)$$

Используя циклическую инвариантность следа, мы видим, что уравнение (17.114) совпадает с тем, что мы ожидали для *зависящего от времени* гейзенберговского оператора  $\hat{A}(t)$  и *стационарной* матрицы плотности

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \text{Tr} \left( e^{(i/\hbar)\hat{H}t} \hat{A} e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} \hat{\rho}(0) \right) = \text{Tr} \left( \hat{A}(t) \hat{\rho}(0) \right). \quad (17.115)$$

Матрица плотности становится *стационарной*, уравнение (17.112), если она коммутирует с полным гамильтонианом. Тогда она может быть диагонализирована одновременно с гамильтонианом, и канонический базис уравнений (17.16, 17.17) совпадает с базисом стационарных состояний. Стационарная матрица плотности является функцией интегралов движения, прежде всего энергии. Это то, что мы видели в описании теплового равновесия (разд. 17.3). Будучи смещена от равновесия возмущением, система будет испытывать *релаксацию* к равновесию. Следы релаксации содержатся в недиагональных матричных элементах матрицы плотности в представлении собственных функций невозмущённого гамильтониана. Эти матричные элементы должны стремиться к нулю. Небольшая часть макроскопической системы может быть (приблизительно, но с высокой степенью точности)

рассмотрена в рамках той же эволюции как результат усреднения по многим актам слабых взаимодействий с окружением. Это стандартный подход в статистической физике равновесных систем.

### 17.8. Ещё о линейном отклике

В терминах матрицы плотности можно описать отклик квантовомеханической системы на возмущение, зависящее от времени. Это может быть, в частности, слабое взаимодействие с окружением. Этот пример иллюстрирует, как теория возмущений может формулироваться на языке матрицы плотности. Мы уже имели дело с теорией линейного отклика в разд. II.15.2-II.15.5.

Пусть зависящее от времени  $\hat{H}'(t)$  возмущение действует на систему, описываемую стационарной матрицей плотности  $\hat{\rho}^\circ$ . Эволюционное уравнение определено в (17.112):

$$i\hbar\dot{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] + [\hat{H}'(t), \hat{\rho}]. \quad (17.116)$$

Равновесная матрица плотности  $\hat{\rho}^\circ$  удовлетворяет уравнению

$$[\hat{H}, \hat{\rho}^\circ] = 0. \quad (17.117)$$

Для достаточно слабого возмущения мы можем искать решение для матрицы плотности с малой неравновесной добавкой, наложенной на стационарное решение

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}^\circ + \hat{\rho}'(t), \quad (17.118)$$

где мы предположим, что зависящая от времени часть пропорциональна возмущению (*линейное приближение*). Эта аппроксимация справедлива, если система *стабильна*, и слабое возмущение не приводит к изменению ее структуры. Часть линейного отклика  $\hat{\rho}'(t)$  удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\dot{\rho}' = [\hat{H}, \hat{\rho}'] + [\hat{H}'(t), \hat{\rho}'], \quad (17.119)$$

где мы пренебрегаем членом второго порядка  $[\hat{H}'(t), \hat{\rho}'(t)]$ .

#### Задача 17.13

Показать, что операторное решение уравнения (17.112) для возмущения, которое началось в отдаленном прошлом  $t \rightarrow -\infty$ , может быть записано

как

$$\hat{\rho}'(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{(i/\hbar)\hat{H}(t'-t)} [\hat{H}'(t'), \hat{\rho}^\circ] e^{-(i/\hbar)\hat{H}(t'-t)}. \quad (17.120)$$

### Решение.

Проверяем прямым дифференцированием. Первый член (17.116) исключается использованием картины Гейзенберга по отношению к невозмущенному гамильтониану  $\hat{H}$ , уравнение (17.113).

Коммутатор  $[\hat{H}'(t'), \hat{\rho}^\circ]$  может быть сведен к коммутатору с невозмущенным гамильтонианом для случая теплового равновесия, когда матрица плотности  $\hat{\rho}^\circ$  имеет канонический экспоненциальный вид (17.33). Действительно, для любого оператора  $\hat{A}$ , предполагая, что

$$[\hat{A}, e^{-\beta\hat{H}}] = e^{-\beta\hat{H}} \hat{X}(\beta), \quad (17.121)$$

поэтому  $\hat{X}(0) = 0$ , мы приходим к производной

$$\frac{d\hat{X}}{d\beta} = e^{\beta\hat{H}} [\hat{H}, \hat{A}] e^{-\beta\hat{H}}. \quad (17.122)$$

Беря теперь интеграл  $\int_0^\beta$  в обеих частях, мы находим  $X(\beta)$  и

$$[\hat{A}, e^{-\beta\hat{H}}] = e^{-\beta\hat{H}} \int_0^\beta d\beta' e^{\beta'\hat{H}} [\hat{H}, \hat{A}] e^{-\beta'\hat{H}}. \quad (17.123)$$

Мы используем это тождество для вывода известной *формулы Кубо*. Поскольку все функции  $\hat{H}$  коммутируют, решение (17.120) можно записать теперь как

$$\hat{\rho}'(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{\rho}^\circ \int_{-\infty}^t dt' \int_0^\beta d\beta' e^{[(i/\hbar)(t'-t)+\beta']\hat{H}} [\hat{H}, \hat{H}'(t')] e^{-[(i/\hbar)(t'-t)+\beta']\hat{H}}. \quad (17.124)$$

## 17.9. Электропроводность

Применим разработанный формализм к системе с подвижными электронами в однородном, достаточно слабом электрическом поле  $\mathcal{E}$ , когда

возмущение имеет вид

$$\hat{H}'(t) = - \sum_a e_a (\mathcal{E}(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}_a) = - \int d^3r (\mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{r}) \sum_a e_a \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a). \quad (17.125)$$

При тепловом равновесии (матрица плотности  $\hat{\rho}^\circ$ ) электрические токи отсутствуют, но они появляются в присутствии электрического поля, которое может быть либо внешнего происхождения, либо результатом тепловых флуктуаций. В линейном приближении возникший ток  $\mathbf{j}$  пропорционален полю, как это выражено *законом Ома*

$$j_i(t) = \int_{-\infty}^t dt' \sigma_{ik}(t-t') \mathcal{E}_k(t'). \quad (17.126)$$

Отклик является *причинным* (см. гл. II.15), ток реагирует только на поле, действовавшее в более ранние моменты времени. Пропорциональность реализуется с помощью *тензора проводимости*  $\sigma_{ik}(\tau)$ , который зависит от времени запаздывания  $\tau$  между возмущением и откликом. В кристаллах отклик часто *анизотропен*, поэтому нам нужен тензор, а не скалярная константа.

Запаздывающая временная зависимость определяет *частотную дисперсию* отклика. Вводя  $\tau = t - t'$ , мы перепишем (17.126) как

$$j_i(t) = \int_0^\infty d\tau \sigma_{ik}(\tau) \mathcal{E}_k(t - \tau). \quad (17.127)$$

Эта свертка может быть записана как прямая пропорциональность между Фурье-компонентами тока и поля:

$$j_{i;\omega} = \int_0^\infty d\tau \sigma_{ik}(\tau) e^{i\omega\tau} \mathcal{E}_{k;\omega} \equiv \sigma_{ik;\omega} \mathcal{E}_{k;\omega}. \quad (17.128)$$

В более общей ситуации, которую мы здесь не рассматриваем, нужен также *нелокальный в пространстве* отклик, когда поле в одной точке наводит ток в других местах, поэтому  $\sigma$  зависит от координат (*пространственная дисперсия*) или, в Фурье-представлении, от волнового вектора.

В равновесии среднее значение тока исчезает

$$\text{Tr}(\mathbf{j}\hat{\rho}^\circ) = 0, \quad (17.129)$$

и только возмущение  $\hat{\rho}'$  матрицы плотности даёт вклад в среднее значение тока

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \rangle = \text{Tr} \left\{ \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}' \right\}. \quad (17.130)$$

Оператор  $\hat{\rho}'$  должен быть найден из (17.124) для возмущения (17.125). Коммутатор  $[\hat{H}', \hat{H}]$  для  $\hat{H}'$ , зависящего только от координат, определяется кинетической энергией:

$$[\hat{H}, \hat{H}'(t)] = [\hat{K}, \hat{H}'(t)] = - \int d^3r (\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \mathbf{r}) \sum_a \frac{e_a}{2m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a^2, \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a)]. \quad (17.131)$$

Коммутатор под интегралом приводит к

$$\sum_a \frac{e_a}{2m_a} \left[ \hat{\mathbf{p}}_a, (-i\hbar \nabla_a) \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a) \right]_+ = i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} \sum_a \frac{e_a}{2m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a, \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a)]_+. \quad (17.132)$$

Сумма в (17.132) является локальным оператором плотности электрического тока, который отличается от вероятностного тока (17.50) присутствием электрических зарядов  $e_a$ :

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \sum_a \frac{e_a}{2m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a, \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a)]_+. \quad (17.133)$$

Окончательно, интегрируя по частям, мы переносим градиент на вектор  $\mathbf{r}$  и получаем

$$[\hat{H}, \hat{H}'(t)] = i\hbar \int d^3r \left( \vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \right). \quad (17.134)$$

Это выражение имеет ясный смысл мощности, выделяемой электрическим полем, которое производит работу над движущимися частицами в объеме системы.

Таким образом, мы получили возмущение (17.124) матрицы плотности слабым электрическим полем:

$$\hat{\rho}'(t) = \hat{\rho}^\circ \int_{-\infty}^t dt' \int_0^\beta d\beta' e^{[(i/\hbar)(t-t') + \beta'] \hat{H}} \int d^3r \left( \vec{\mathcal{E}}(t') \cdot \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \right) e^{-[\beta' + (i/\hbar)(t'-t)] \hat{H}}. \quad (17.135)$$

Собирая все результаты в (17.127), мы приходим к тензору проводимости (17.126):

$$\sigma_{ik}(\tau) = \int_0^\beta d\beta' \left\langle \hat{j}_i e^{[(i/\hbar)\tau + \beta'] \hat{H}} \int d^3r \hat{j}_k(\mathbf{r}) e^{[-(i/\hbar)\tau - \beta'] \hat{H}} \right\rangle. \quad (17.136)$$

Здесь усреднение означает след с невозмущённой матрицей плотности  $\hat{\rho}^0$ .

Результат включает оператор тока, взятый в картине Гейзенберга в комплексном времени,

$$e^{[(i/\hbar)\tau+\beta]\hat{H}}\hat{j}_k e^{[(i/\hbar)\tau+\beta]\hat{H}} \equiv j_k(\tau - i\hbar\beta). \quad (17.137)$$

Финальная формула Кубо теперь может быть написана как корреляционная функция двух операторов тока

$$\sigma_{ik}(\tau) = \int_0^\beta d\beta' \left\langle \hat{j}_i(0) \int d^3r \hat{j}_k(\mathbf{r}, \tau - i\hbar\beta') \right\rangle, \quad (17.138)$$

где первый оператор тока берется в произвольной точке, например, в начале координат (система предполагается пространственно однородной).

Формула Кубо упрощается при высокой температуре,  $\beta \rightarrow 0$ . Характерная разность времен  $\tau$ , соответствующая заметной амплитуде отклика, является временем корреляции  $\tau_r$ ; токи, разделенные временным интервалом  $\Delta t \geq \tau_r$ , не коррелируют, и среднее значение их коррелятора исчезает. Физически это может быть время между столкновениями частиц. При высокой температуре  $\hbar\beta = \hbar/T$  становится много меньше, чем  $\tau_r$ . Пренебрегая  $\beta'$  в экспоненте, получаем интеграл равным  $\beta = 1/T$ , и результат становится

$$\sigma_{ik}(\tau) = \frac{1}{T} \left\langle \hat{j}_i(0) \int d^3r \hat{j}_k(\mathbf{r}, \tau) \right\rangle. \quad (17.139)$$

Формулы Кубо (17.138, 17.139) являются типичным примером вывода *кинетических коэффициентов* для слабых отклонений от статистического равновесия. В левой части тензор проводимости говорит о сопротивлении и омических потерях в среде. Правая часть – это корреляционная функция токов, относящаяся к флуктуациям, которые исчезают, когда система релаксирует к равновесию. Таким образом, мы имеем здесь частную форму *флуктуационно-диссипативной теоремы* [71]. Флуктуационные и диссипативные явления должны быть связаны в равновесии, поскольку любая флуктуация внешнего (наведённая внешним полем) или внутреннего происхождения должна затухать (с диссипацией энергии), чтобы гарантировать истинное термодинамическое равновесие.

**Дополнительная литература:** [71], [111], [112], [113]

Наука — это попытка привести хаотическое многообразие нашего чувственного опыта в соответствие с логически последовательной системой мышления.

А. Эйнштейн. «Физика и реальность»

## Глава 18

### Квантовый хаос

#### 18.1. Классический и квантовый хаос

С недавних пор стало известно, что проявление *хаотической динамики* в классических системах является скорее правилом, чем исключением [114]. Хаос возникает из-за высокой *чувствительности* решений детерминистических уравнений движения к малым вариациям начальных условий. Решения стабильны лишь в простейших случаях — таких, как гармонический осциллятор или задача Кеплера. Неизбежные возмущения могут изменить характер движения от регулярного к хаотическому.

*Интегрируемое* движение в системах с  $n$  степенями свободы характеризуется существованием  $n$  *интегралов движения*  $F_i$ , являющихся однозначными функциями переменных (координат  $\{q_a\}$  и импульсов  $\{p_a\}$ ,  $a = 1, \dots, n$ ) в *инволюции*. Последнее означает, что они сохраняются одновременно, т. е. для них скобки Пуассона (1.7.93) обращаются в нуль:  $\{F_i, F_j\} = 0$ . Это дает возможность [1] перейти с помощью канонического преобразования к переменным *действие-угол*, к  $n$  парам сохраняющихся импульсов  $I_i$  и сопряженных им циклических координат (углов)  $\vartheta_i$  таких, что преобразованный гамильтониан оказывается от этих углов независимым:  $H = H(I)$ . Уравнения движения Гамильтона (1.91) в этих новых переменных приобретают вид:

$$\dot{I}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vartheta_i} = 0, \quad \dot{\vartheta}_i = \frac{\partial H}{\partial I_i} \equiv \omega_i(I). \quad (18.1)$$

Движение для каждой из разделяющихся переменных в конечной системе является периодическим, и последнее уравнение определяет соответствующие частоты:

$$\vartheta_i(t) = \vartheta_i(0) + \omega_i t. \quad (18.2)$$

При несоизмеримых (иррациональных) отношениях частот движение *квазипериодично*. Для траекторий со слегка различающимися частотами накапливающаяся разница фаз (18.2) растет во времени линейно.

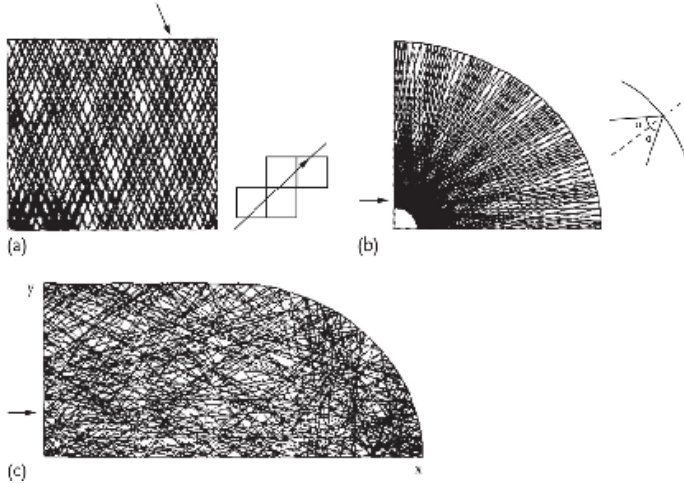


Рис. 18.1. Регулярное движение (одна траектория) в прямоугольном (a) и круглом (b) бильярдах, и хаотическое движение (300 отражений) в бильярде-стадионе (c) (иллюстрация предоставлена К. Левенкопфом (C. Lewenkopf))

Обычно существование интегралов движения связано с наличием симметрии в системе. Если симметрии разрушены, система становится неинтегрируемой, и единственной характеристикой траектории остаются ее начальные условия. Однако из-за высокой чувствительности к малым изменениям начальных условий близкие в фазовом пространстве траектории расходятся со временем экспоненциально — расстояние между ними растет как  $\sim \exp(\Lambda t)$ , где  $\Lambda$  — так называемый *показатель Ляпунова*. В этой ситуации даже небольшие ошибки округления в определении начальных условий приводят спустя некоторое время к совершенно различным траекториям. Несмотря на полное знание описывающих движение простых динамических законов предсказуемость движения оказывается утраченной. В прямоугольном бильярде (рис. 18.1, a) с зеркальным отражением от стенок импульс сохраняется по абсолютной величине; добавление со всех сторон идентичных копий бильярда позволяет «распутать» траекторию так, что она превращается в прямую линию. В круглом бильярде (рис. 18.1, b) сохраняется угловой момент. В случае же бильярда в форме стадиона (c) граничные условия несовместимы с сохранением и импульса,

и момента импульса. В результате одиночная траектория покрывает все фазовое пространство и в пределе больших времен остается возможным лишь статистическое описание.

Точного аналога подобного классического хаоса в квантовой механике нет, поскольку само квантовое описание является *вероятностным* изначально. Задание с произвольной точностью начальных условий в фазовом пространстве невозможно из-за соотношения неопределённостей. Волновой пакет, отвечающий начальной волновой функции, подвержен квантовому расплыванию, которое спустя некоторое время  $t$  скроет классическое разбегание траекторий. Это объясняет причину, по которой многие авторы предпочитают говорить лишь о *квантовых проявлениях классического хаоса* [115], т. е. об особенностях поведения квантовых систем, отражающих наличие хаоса в динамике их классических аналогов.

Можно показать, что динамика, порождаемая уравнением Шредингера для замкнутой системы с не зависящим от времени гамильтонианом  $\hat{H}$ , *интегрируема*, по крайней мере в области дискретного спектра, в частности — для частицы в бильярде, независимо от формы его границ. Амплитуды  $C_k(t)$  волновой функции  $|\Psi(t)\rangle = \sum_k C_k(t)|k\rangle$  в произвольном полном ортонормированном базисе состояний  $|k\rangle$  удовлетворяют системе связанных линейных уравнений

$$i\hbar\dot{C}_k = \sum_l H_{kl}C_l. \quad (18.3)$$

Амплитуды  $C_k$  и матричные элементы  $H_{kl}$  в общем случае комплексны, и можно выделить их действительные и мнимые части

$$C_k = Q_k + iP_k, \quad H_{kl} = H'_{kl} + iH''_{kl}, \quad (18.4)$$

где  $Q_k$ ,  $P_k$ ,  $H'_{kl}$  и  $H''_{kl}$  действительны, причем для эрмитового гамильтониана

$$H'_{kl} = H'_{lk}, \quad H''_{kl} = -H''_{lk}. \quad (18.5)$$

В результате шредингеровская динамика (18.3) приобретает классическую гамильтонову форму

$$\dot{Q}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_k}, \quad \dot{P}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_k} \quad (18.6)$$

с эффективным классическим гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\hbar} \sum_{kl} \left[ H'_{kl}(Q_k Q_l + P_k P_l) + H''_{kl}(P_k Q_l - Q_k P_l) \right], \quad (18.7)$$

который описывает динамику связанных классических осцилляторов. В базисе стационарных состояний квантового гамильтониана  $H_{kl} \rightarrow E_k \delta_{kl}$  антисимметричная часть  $H''$  исчезает, и эффективный гамильтониан (18.7) оказывается очевидно интегрируемым

$$\mathcal{H} \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_k E_k (Q_k^2 + P_k^2), \quad (18.8)$$

описывая набор *независимых* осцилляторов. Классически движение такой системы регулярно и квазипериодично.

На проблему квантового хаоса возможен взгляд и с другой стороны: от классической квантовая эволюция отклоняется лишь на временах  $t > t^*$ . Математически это может быть сформулировано как существование двух различных предельных переходов. С одной стороны, сначала полагая  $\hbar \rightarrow 0$ , мы через квазиклассическую область попадаем в область классической механики. Там мы можем долго, до  $t \gg t^*$ , двигаться вдоль классических траекторий. С другой стороны, точная квантовая эволюция вплоть до  $t \gg t^*$  с последующим переходом в конце к классическому пределу  $\hbar \rightarrow 0$  приведет к другому результату — т. е. эти два предельных перехода *не коммутируют*. Отсюда ясно, что классический хаос оказывается лишь (кратко)временным этапом эволюции квантовой системы. Конечно, в реальности время  $t^*$  может оказаться и астрономически большим. Наше доказательство регулярности шредингеровской динамики уязвимо при применении к очень большим системам, в пределе базиса бесконечной размерности: в этом случае квазипериодическое движение огромного числа мод с несоизмеримыми частотами может оказаться неотличимым от хаотического из-за все более растущей примеси удаленных состояний с сильно осциллирующими волновыми функциями в процессе долговременной эволюции. В этом случае хаос проявится скорее в гильбертовом, чем в обычном фазовом пространстве.

## 18.2. Локальная спектральная статистика: распределение Пуассона

Простейшие проявления квантового хаоса видны в корреляциях и флуктуациях энергетических уровней. В соответствии с гипотезой [116], квантовые спектры систем, хаотических в классическом пределе, имеют универсальные статистические свойства.

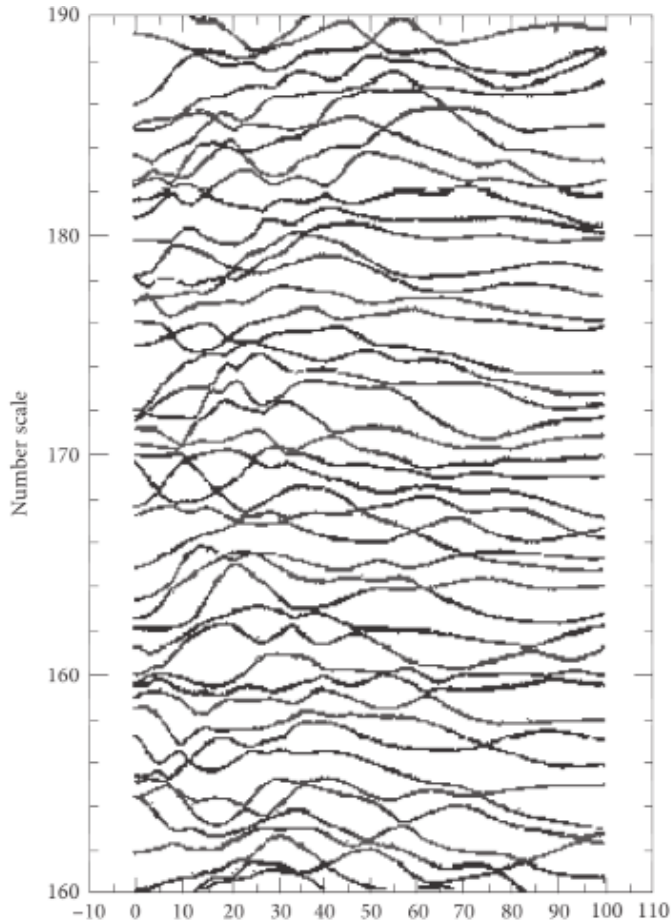


Рис. 18.2. Динамика уровней в зависимости от интенсивности взаимодействия (0 соответствует невзаимодействующим частицам, 100 — реалистической интенсивности взаимодействий) в оболочечной модели ядра [117]

Как обсуждалось в разд. I.10.5, энергетические термы *одинаковой симметрии* отталкиваются друг от друга в процессе эволюции как функции плавно меняющихся параметров системы. На малых расстояниях  $s$  типичным оказывается линейное расталкивание  $\propto s$  (I.10.45).

Состояния *разной симметрии* не смешиваются, если гамильтониан имеет данную симметрию, соответственно в процессе параметрической эволюции такие уровни могут пересекаться. Возникновение хаоса является следствием разрушения в системе симметрий, которое смешивает уровни различных семейств и заставляет их избегать пересечения. В одночастичном движе-

нии (типа бильярда) за смешивание уровней ответственны граничные условия. В многочастичной системе эти эффекты порождаются *взаимодействиями*, смешивающими конфигурации невзаимодействующих частиц. Парадоксально, но это означает, что в хаотических системах структура уровней выглядит более упорядоченной, «турбулентный» поток становится «ламинарным» (см. рис. 18.2). Здесь фрагмент спектра (все состояния имеют одни и те же квантовые числа  $J = T = 0$ ) показан для оболочечной модели [117] ядра  $^{24}\text{Mg}$ , в зависимости от интенсивности взаимодействий. Все пересечения уровней подавлены.

Как первый пример рассмотрим *регулярную* квантовую систему, где мы имеем независимые последовательности (семейства) уровней с различными точными квантовыми числами. Пусть  $j$ -я последовательность имеет среднее расстояние между соседними уровнями  $D_j$ , отвечающее парциальной плотности уровней  $\rho_j = 1/D_j$ ; полная плотность уровней  $\rho = \sum_j \rho_j$ . Для каждой последовательности можно определить распределение расстояний между ближайшими уровнями, вероятность  $P_j(s)$  обнаружения пары смежных уровней на расстоянии  $s$ . Мы хотим найти полное распределение  $P(s)$  для всех пар соседних уровней, не ограничиваясь их принадлежностью к одному и тому же семейству. Для удобства введем вероятность

$$W(s) = \int_s^\infty dx P(x) \quad (18.9)$$

найти следующий уровень на расстоянии больше чем  $s$  от уровня, расположенного в начале отсчета энергии.

Для начала рассмотрим два семейства с соответствующими парциальными распределениями ближайших расстояний  $P_1(s)$  и  $P_2(s)$ . Так же, как и в (18.9), введем функции  $W_{1,2}(s)$ , подставляя в подынтегральное выражение  $P_{1,2}(x)$  вместо  $P(x)$ . Следующий (за исходным) уровень может принадлежать любому из семейств с относительной вероятностью  $\rho_{1,2}/\rho$ . Если он принадлежит семейству 1 и расположен на расстоянии  $> s$ , то уровни семейства 2 в интервале  $[0, s]$  отсутствуют. Обозначим плотность вероятности такого отсутствия  $Q_2(s)$ . Аналогичным образом можно определить и  $Q_1(s)$ . Тогда функция (18.9) удовлетворяет логическому тождеству

$$W(s) = \frac{\rho_1}{\rho} \int_s^\infty dx P_1(x) Q_2(s) + \frac{\rho_2}{\rho} \int_s^\infty dx P_2(x) Q_1(s). \quad (18.10)$$

Введем условную плотность вероятности  $R_2(s)$  обнаружения ближайшего уровня 2 в интервале  $[s, s + ds]$  при условии, что уровень 1 расположен

в начале отсчета энергии. Тогда предшествующий уровень семейства  $\mathcal{L}$  может находиться лишь где-то ниже нулевой точки, и расстояние между этими последовательными уровнями семейства  $\mathcal{L}$  больше, чем  $s$ . Поэтому  $R_2(s)$  пропорционально  $W_2(s)$ :

$$R_2(s) = \text{const } W_2(s) = \text{const} \int_s^\infty dx P_2(x). \quad (18.11)$$

Константа определена условием нормировки

$$\int_0^\infty ds R_2(s) = 1. \quad (18.12)$$

(Предыдущий уровень может находиться где угодно ниже нулевой точки). Меняя порядок интегрирования аналогично тому, как это делалось при выводе хронологического произведения в уравнении (II.10.28), получим

$$\int_0^\infty ds \int_s^\infty dx P_2(x) = \int_0^\infty dx \int_0^x ds P_2(x) = \int_0^\infty dx x P_2(x) = D_2, \quad (18.13)$$

среднее межуровневое расстояние в семействе  $\mathcal{L}$ . В результате

$$R_2(s) = \rho_2 \int_s^\infty dx P_2(x). \quad (18.14)$$

Таким образом, уравнение (18.10) приобретает вид ( $D = 1/\rho$  — среднее межуровневое расстояние в объединённой последовательности уровней двух семейств)

$$W(s) = D \left[ R_1(s) Q_2(s) + R_2(s) Q_1(s) \right]. \quad (18.15)$$

Функции  $Q_j(s)$  и  $R_j(s)$  связаны очевидным соотношением

$$Q_j(s) = \int_s^\infty dx R_j(x) \quad (18.16)$$

(если ближайший уровень находится на расстоянии  $> s$ , он отсутствует в интервале  $[0, s]$ ). Поэтому

$$R_j(s) = -\frac{dQ_j}{ds}, \quad (18.17)$$

и из (18.15) следует

$$W(s) = -D \left( \frac{dQ_1}{ds} Q_2 + \frac{dQ_2}{ds} Q_1 \right) = -D \frac{d}{ds} (Q_1 Q_2). \quad (18.18)$$

Для большого числа семейств те же соображения позволяют получить

$$W(s) = -D \frac{dQ}{ds}, \quad Q \equiv \prod_{j=1}^n Q_j. \quad (18.19)$$

Из смысла  $W(s)$ , определённой в (18.9), имеем

$$P(s) = D \frac{d^2 Q}{ds^2}. \quad (18.20)$$

С другой стороны, из уравнений (18.16) и (18.14) следует

$$D_j Q_j(s) = \int_s^\infty dy \int_y^\infty dx P_j(x) = \int_s^\infty dx \int_s^x dy P_j(x) = \int_s^\infty dx (x-s) P_j(x). \quad (18.21)$$

Для малых расстояний  $s < D_j$ , с учетом определения среднего межуровневого интервала  $D_j$  и нормировки  $P_j$ , это дает

$$Q_j(s) \approx 1 - \frac{s}{D_j} \rightsquigarrow Q \approx \prod_j \left( 1 - \frac{s}{D_j} \right). \quad (18.22)$$

Если все  $D_j$  одного порядка,  $D_j \sim nD$ , то для большого числа накладывающихся друг на друга семейств  $n \gg 1$  приходим к *экспоненциальному* поведению

$$Q \sim \left( 1 - \frac{s}{nD} \right)_{n \gg 1}^n \sim e^{-s/D}. \quad (18.23)$$

Следовательно, распределение по расстояниям между соседними уровнями (18.20) ведет себя как

$$P(s) \approx \frac{1}{D} e^{-s/D}. \quad (18.24)$$

Хотя наш вывод не позволяет предсказать предельное поведение  $P(s)$  при  $s \gg D$ , при больших  $s$  функция  $P(s)$  заведомо быстро стремится к нулю. Выражение (18.24) применительно ко всем  $s$  называют *распределением Пуассона*. Оно хорошо согласуется с численным моделированием суперпозиций нескольких независимых семейств уровней, когда для данного уровня наиболее вероятный ближайший сосед принадлежит другим семействам. В

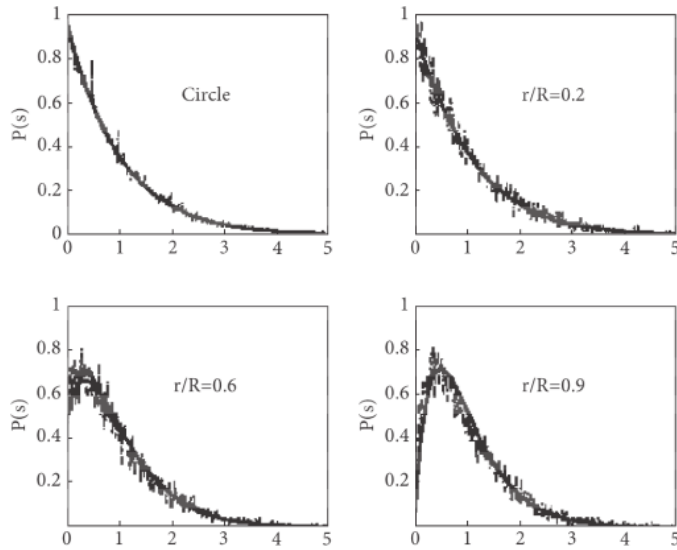


Рис. 18.3. Распределение интервалов между ближайшими уровнями для круглого бильярда радиуса  $R$  (распределение Пуассона) и его эволюция при помещении внутри бильярда на радиусе  $r$  точечного  $\delta$ -рассеивателя [118]

этом случае отталкивания между смежными уровнями нет, распределение межуровневых интервалов максимально для малых интервалов, а большие флуктуации ведут к заметным пустотам в спектре. Известно, что распределение Пуассона описывает во времени случайную последовательность актов радиоактивного распада. В нашем случае распределение Пуассона для расстояний между соседними уровнями может рассматриваться как признак *регулярной динамики* (см. рис. 18.3).

Предыдущее рассмотрение неявно базировалось на предположении, что существует функция  $P(s)$ , которая не зависит от абсолютного положения изучаемых уровней на шкале энергии. Это свойство *спектральной эргодичности* имеет место лишь тогда, когда средние характеристики спектров — такие, как парциальные плотности  $\rho_j$ , фиксированы. В реальных системах плотность уровней быстро растет с энергией. Поэтому применительно к спектральной статистике мы подчеркиваем слово «локальная». *Глобальные*, или *секулярные* свойства спектров не универсальны. Универсальность может быть восстановлена посредством масштабирования спектров [119] путем измерения межуровневых интервалов  $s$  в единицах локального среднего межуровневого расстояния  $D$ . Это позволяет сравнивать между собой

различные участки спектров, принадлежащие даже разным системам. Часто этим пользуются для того, чтобы увеличить объем данных и повысить статистическую надежность результатов.

### 18.3. Гауссов ортогональный ансамбль

Теперь мы попытаемся описать *хаотическую* квантовую систему. Рассмотрим набор квантовых состояний, возникающих в результате процесса перемешивания, превращающего волновые функции в очень сложные комбинации исходных «простых» базисных состояний. Предположим, что все состояния принадлежат к одному и тому же классу по отношению к имеющимся точным симметриям — т. е. они могут смешиваться.

Ключевым является вопрос о такой формулировке критерия *предельного хаоса*, которую можно было бы взять в качестве отправной точки. Огромная матрица гамильтониана в исходном «простом» базисе весьма сложна. Однако предположение об эргодичности открывает возможность рассматривать различные подматрицы  $H$  как новые копии некоторого *ансамбля матриц*. Выясним, каким должно быть распределение вероятности  $P(H)$  матриц  $H$  для случая предельного хаоса. Поскольку после перемешивания связь с первоначальным базисом теряется, его в определенном смысле можно считать *случайным* — любой другой базис был бы столь же хорош. Тем самым мы приходим к формулировке основного требования предельного хаоса: вероятность  $P(H)$  должна быть инвариантна по отношению к преобразованиям базиса. Матричные элементы гамильтониана в произвольно выбранном базисе предполагаются *независимыми и некоррелированными*, и искомая вероятность  $P(H)$  сводится к *произведению* вероятностей  $P_{ij}(H_{ij})$  индивидуальных матричных элементов. Сформулированные условия достаточны для определения явного вида функции  $P(H)$ . Ниже мы последуем способу, предложенному в [10].

Прежде всего определимся с классом описываемых систем. Мы рассмотрим ансамбль систем, *инвариантных по отношению к обращению времени*. Как мы знаем из разд. 2.1, в этом случае для волновых функций всегда можно выбрать вещественный базис. Так как гамильтониан должен быть эрмитовым, каждый элемент такого ансамбля представляет собой *вещественную симметричную* матрицу  $H_{ij} = H_{ji}$ , а допустимые преобразования принадлежат к классу *ортогональных*. Предположение об

отсутствии корреляций приводит к анзацу:

$$P(H) = \prod_{ij(i \leq j)} P_{ij}(H_{ij}), \quad (18.25)$$

а инвариантность по отношению к ортогональным преобразованиям требует, чтобы распределение вероятности  $P(H)$  для матричных элементов  $H_{i'j'}$  было одним и тем же во всех других базисах.

Достаточно рассмотреть блок матрицы размером  $2 \times 2$  с вещественными элементами  $H_{11}$ ,  $H_{22}$  и  $H_{12} = H_{21}$ . Совместная вероятность наличия трех заданных значений матричных элементов в выбранном базисе равна

$$P(H) = P_{11}(H_{11})P_{12}(H_{12})P_{22}(H_{22}). \quad (18.26)$$

Ортогональное преобразование базиса в данном случае — обычный поворот, параметризованный углом  $\theta$ , к векторам нового базиса:

$$|1'\rangle = \cos \theta |1\rangle - \sin \theta |2\rangle, \quad |2'\rangle = \sin \theta |1\rangle + \cos \theta |2\rangle. \quad (18.27)$$

Матричные элементы в новом базисе равны

$$H_{1'1'} = \cos^2 \theta H_{11} + \sin^2 \theta H_{22} - 2 \sin \theta \cos \theta H_{12},$$

$$H_{2'2'} = \sin^2 \theta H_{11} + \cos^2 \theta H_{22} + 2 \sin \theta \cos \theta H_{12} \quad (18.28)$$

и

$$H_{1'2'} = \sin \theta \cos \theta (H_{11} - H_{22}) + (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) H_{12}. \quad (18.29)$$

### Задача 18.1

Выпишите условия инвариантности для бесконечно малого поворота, удерживая лишь линейные по  $\theta$  члены, получите дифференциальные уравнения для вероятностей  $P_{ij}$  и найдите их решения.

### Решение.

Условие инвариантности имеет вид

$$\begin{aligned} & P_{11}(H_{11})P_{12}(H_{12})P_{22}(H_{22}) = \\ & = \left[ P_{11}(H_{11}) - 2\theta H_{12} \frac{dP_{11}}{dH_{11}} \right] \left[ P_{12}(H_{12}) + \theta(H_{11} - H_{22}) \frac{dP_{12}}{dH_{12}} \right] \times \\ & \quad \times \left[ P_{22}(H_{22}) + 2\theta H_{12} \frac{dP_{22}}{dH_{22}} \right]. \end{aligned} \quad (18.30)$$

В линейном приближении

$$H_{12} \left( \frac{1}{P_{22}} \frac{dP_{22}}{dH_{22}} - \frac{1}{P_{11}} \frac{dP_{11}}{dH_{11}} \right) + \frac{1}{2} (H_{11} - H_{22}) \frac{1}{P_{12}} \frac{dP_{12}}{dH_{12}} = 0. \quad (18.31)$$

Стандартная процедура разделения переменных вводит две константы,  $C$  и  $E_0$ , а результатом после соответствующей нормировки является произведение трёх *гауссовых* распределений:

$$P_{11} = \sqrt{\frac{C}{4\pi}} e^{-C(H_{11}-E_0)^2/4}, \quad P_{22} = \sqrt{\frac{C}{4\pi}} e^{-C(H_{22}-E_0)^2/4},$$

$$P_{12} = \sqrt{\frac{C}{2\pi}} e^{-CH_{12}^2/2}. \quad (18.32)$$

Заметим, что полная вероятность (48.19) может быть записана как

$$P(H) = \text{const } e^{-(C/4)[(H_{11}-E_0)^2+(H_{22}-E_0)^2+H_{12}^2+H_{21}^2]} =$$

$$= \text{const } e^{-(C/4)\text{Tr}[(\hat{H}-E_0\hat{1})^2]}, \quad (18.33)$$

т. е. выражена явно через инвариантный след оператора  $\hat{H} - E_0\hat{1}$ .

Выбор центроида спектра  $E_0$  значения не имеет, и он может быть положен равным нулю. Таким образом, предельный хаос соответствует гауссову распределению с нулевым средним значением и одной и той же дисперсией для всех диагональных элементов, тогда как для всех недиагональных элементов дисперсия оказывается вдвое меньшей:

$$\overline{H_{\text{diag}}^2} = \frac{2}{C}, \quad \overline{H_{\text{off-diag}}^2} = \frac{1}{C}. \quad (18.34)$$

Отсутствие корреляций между различными элементами позволяет представить этот результат в виде

$$\overline{H_{ij}H_{kl}} = (\delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ik}\delta_{jl}) \frac{a^2}{4N}, \quad (18.35)$$

где использовано новое обозначение  $C = 4N/a^2$  и введена размерная инвариантность (скейлинг) матричных элементов, обратно пропорциональных квадратному корню из размера матрицы  $N$ . Явное выделение скейлинга необходимым не является, но удобно при сравнении результатов для разных

размеров матриц, так как среднее значение

$$\overline{(\text{Tr } H)^2} = \sum_{ij} \overline{H_{ii}H_{jj}} = \sum_{ij} 2\delta_{ij} \frac{a^2}{4N} = \frac{a^2}{2} \quad (18.36)$$

не зависит от  $N$ , и мы можем рассматривать предел  $N \rightarrow \infty$ .

## 18.4. Распределение межуровневых интервалов

Непосредственное обобщение двумерного результата (18.33) на произвольные размерности приводит к *гауссову ортогональному ансамблю* (ГОА) случайных вещественных симметричных матриц, определяемому нормированной (ср. с (18.32)) функцией распределения

$$P(H) = \left( \sqrt{\frac{C}{2\pi}} \right)^{N(N-1)/2} \left( \sqrt{\frac{C}{4\pi}} \right)^N e^{-N\text{Tr}(\hat{H}^2)/a^2} \quad (18.37)$$

или эквивалентным выражением (18.35).

Вероятность (18.37) зависит лишь от  $N$  собственных значений  $E_\alpha$

$$\text{Tr}(\hat{H}^2) = \sum_{\alpha=1}^N E_\alpha^2, \quad (18.38)$$

а не от  $N(N-1)/2$  углов  $\theta_i$ , определяющих «ориентацию» данного базиса по отношению к собственному базису (в примере  $N=2$  (18.27) у нас был только один угол). *Мерой*  $d\mu$  в пространстве случайных матриц  $H$  при вычислении наблюдаемых вероятностей является «декартово» произведение дифференциалов независимых матричных элементов  $dH_{11} dH_{12} dH_{22}, \dots$ , т. е. среднее по ансамблю должно вычисляться в соответствии с

$$\overline{F(H)} = \int d\mu P(H)F(H) = \int \prod_{ij(i<j)} dH_{ij} F(H)P(H). \quad (18.39)$$

Для получения распределения собственных значений нам нужно сделать преобразование к переменным  $\{E_\alpha, \theta_i\}$  и проинтегрировать  $P(H)$  по несущественным углам. Результат опять может быть понят на примере случая  $N=2$ .

### Задача 18.2

Вычислите якобиан  $J$  для преобразования от исходного базиса  $(H_{11}, H_{22}, H_{12})$  к набору переменных  $(E_1, E_2, \theta)$ .

**Решение.**

Из уравнений (18.28) и (18.29) следует, что данное преобразование имеет вид

$$\begin{aligned} H_{11} &= E_1 \cos^2 \theta + E_2 \sin^2 \theta, & H_{22} &= E_1 \sin^2 \theta + E_2 \cos^2 \theta, \\ H_{12} &= (E_1 - E_2) \sin \theta \cos \theta. \end{aligned} \quad (18.40)$$

откуда

$$J = \frac{\partial(H_{11}, H_{22}, H_{12})}{\partial(E_1, E_2, \theta)} = E_1 - E_2. \quad (18.41)$$

Якобиан (18.41) при пересечении уровней обращается в нуль. Это вполне ожидаемо из того, что преобразование к собственным значениям и углам оказывается в этом случае *сингулярным* (обратное преобразование при пересечении уровней не определено, так как может быть взята любая суперпозиция вырожденных уровней). Результирующее распределение для матриц  $2 \times 2$  оказывается однородным по  $\theta$ :

$$P(E_1, E_2, \theta) = \text{const} |E_1 - E_2| e^{-2(E_1^2 + E_2^2)/a^2}. \quad (18.42)$$

Несмотря на отсутствие корреляций между матричными элементами, положения уровней скоррелированы из-за расталкивания уровней (см. разд. I.10.5). В согласии с нашим прежним выводом, в случае обратимой во времени динамики расталкивание уровней линейно.

**Задача 18.3**

Для двумерного случая найдите распределение  $P(s)$  межуровневых интервалов  $s$  — расстояний между  $E_1$  и  $E_2$  и вычислите средний интервал  $D$ .

**Решение.**

Нормируя вероятность (18.42) и интегрируя, найдем распределение

$$P(s) = \int dE_+ dE_- d\theta P(E_+, E_-, \theta) \delta(s - E_+ + E_-) = \frac{2s}{a^2} e^{-s^2/a^2} \quad (18.43)$$

с характерным расталкиванием уровней на малых расстояниях и с гауссовым хвостом на больших. Средний интервал равен

$$D = \int_0^\infty ds s P(s) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} a. \quad (18.44)$$

В безразмерных переменных  $x = s/D$  получим распределение (или гипотезу) Вигнера [120, с. 199]:

$$P(x) dx = \frac{\pi x}{2} e^{-(\pi/4)x^2} dx. \quad (18.45)$$

Максимум этой функции (рис. 18.4) отвечает  $x = 2/\pi$ , а общее расположение уровней оказывается гораздо более упорядоченным в отличие от неупорядоченного распределения Пуассона в случае регулярной динамики.

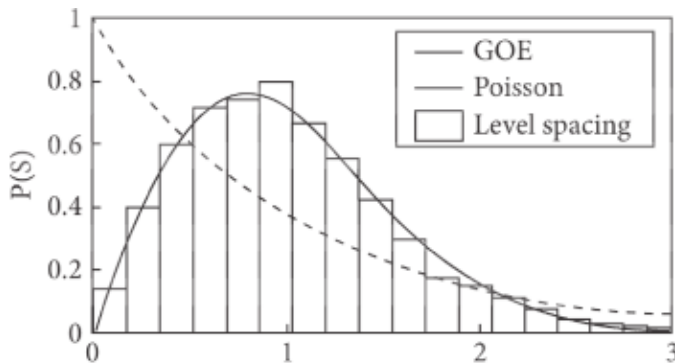


Рис. 18.4. Распределение Вигнера для межуровневых интервалов  $P(x)$ , в сравнении с распределением интервалов в хаотическом бильярде-стадионе [121]

### Задача 18.4

Найти распределение межуровневых интервалов  $P(s)$  для ансамбля эрмитовых случайных вещественных матриц  $2 \times 2$  с гауссовым распределением матричных элементов при нулевом среднем значении и разных дисперсиях,  $\sigma$  для диагональных матричных элементов  $H_{11}$  и  $H_{22}$  и  $\tau$  для недиагональных  $H_{12} = H_{21}$  [122].

### Решение.

Нормированная совместная функция распределения собственных значений  $E_{\pm}$  и углов  $\theta$ , формула (18.27), имеет вид

$$P(E_+, E_-, \theta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{s}{\sigma^2 \tau} e^{-(E_+ + E_-)^2 / 4\sigma^2 - s^2 [\cos^2 \theta / \sigma^2 + \sin^2 \theta / 2\tau^2] / 4}, \quad (18.46)$$

где  $s = E_+ - E_-$ . Как и следовало ожидать, функция распределения для следа матрицы  $E_+ + E_-$ , инвариантного по отношению к ортогональным преобразованиям, не зависит от  $\tau$ . Функция распределения межуровневых

интервалов вычисляется как

$$\begin{aligned}
 P(s) &= \int_{-\infty}^{\infty} dE_+ \int_{-\infty}^{E_+} dE_- \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta P(E_+, E_-, \theta) \delta(s - E_+ + E_-) = \\
 &= \frac{s}{2\sqrt{2}\sigma\tau} e^{-s^2(\sigma^2+2\tau^2)/16\sigma^2\tau^2} I_0\left(\frac{s^2(\sigma^2 - 2\tau^2)}{16\sigma^2\tau^2}\right), \quad (18.47)
 \end{aligned}$$

где  $I_0$  — модифицированная функция Бесселя первого рода,  $I_0(0) = 1$ . Линейное расталкивание на малых  $s$  выжило как универсальное свойство динамики уровней (разд. 4.5). Параметр  $\tau$  оказывает основное влияние на гауссово распределение при больших  $s$ ; распределение Вигнера отвечает  $\tau^2 = \sigma^2/2$ .

Для произвольной размерности  $N$  вместо (18.42) мы получим однородное распределение по углам  $\theta_i$  и попарное линейное расталкивание между всеми уровнями

$$P_{\text{GOE}}(E_1, \dots, E_N) = \text{const}_N \prod_{ij(i<j)} |E_i - E_j| e^{-(N/a^2) \sum_k E_k^2}. \quad (18.48)$$

Хотя распределение по расстояниям между ближайшими уровнями не удается записать в виде аналитической формулы, но численно показано, что  $P(s)$  очень близко к формуле Вигнера (18.45). Вычисления уровней для множества хаотических в классическом пределе систем, таких как бильярды асимметричной формы, подтверждают справедливость этого распределения (рис. 18.4).

Примечательно, что справедливо оно и для систем, у которых не существует явного классического аналога — таких, как сложные атомы [123] и ядра [117]. В таких случаях распределение исходных матричных элементов зависит от базиса и, обычно взятое в базисе невзаимодействующих частиц, оказывается далеким от гауссова. Тем не менее, для локальных спектральных характеристик предсказания ГОА остаются справедливыми в области высокой плотности уровней, где простые невозмущенные волновые функции атомных или ядерных конфигураций полностью перемешаны. Тем самым, область применимости локальных характеристик ГОА оказывается значительно шире, чем это могло бы казаться из их формального определения.

## 18.5. ГОА и информация

Различные разделы физики используют понятие энтропии в различных контекстах. Как сказано в книге «*Quantum Entropy*» [124], энтропия не есть

какая-то определенная величина, а скорее представляет собой целое *семейство* концепций. Общей чертой представителей этого семейства является то, что они выражают меру *неупорядоченности* или *негативной* информации. Тепловая энтропия достигает максимума в равновесном состоянии, определяемом требованием равной вероятности всех микроскопических состояний, совместных с весьма общими макроскопическими условиями, например — заданной средней энергией, определяемой в терминах температуры. В этом случае наблюдатель имеет минимум информации о фактической микроскопической ситуации, вспомним задачи I.6.15 и II.8.12.

Используя то же подход, можно определить информационную энтропию ансамбля гамильтонианов, характеризуемую функцией распределения матричных элементов  $P(H)$ :

$$S = - \int dH P(H) \ln P(H). \quad (18.49)$$

Найдем функцию  $P(H)$ , которая максимизирует энтропию с учетом условия нормировки:

$$I_0 \equiv \int dH P(H) = 1, \quad (18.50)$$

среди всех распределений с одним и тем же центроидом  $E_0$  и той же самой дисперсией,

$$I_2 \equiv \int dH P(H) \text{Tr}\{(\hat{H} - E_0 \hat{1})^2\} = \text{const} \quad (18.51)$$

(иначе и нет возможности сравнивать разные распределения).

Максимум энтропии при дополнительных условиях находится с помощью множителей Лагранжа  $\lambda$  и  $\mu$  поиском безусловного максимума выражения

$$\tilde{S} = S - \lambda I_0 - \mu I_2 \quad (18.52)$$

с последующим определением значений  $\lambda$  и  $\mu$  из требования, чтобы уравнения (18.50) и (18.51) были удовлетворены. Формальная вариация функционала  $\tilde{S}$  по функции распределения  $P(H)$  дает

$$-\ln P - 1 - \lambda - \mu \text{Tr}\{(\hat{H} - E_0 \hat{1})^2\} = 0. \quad (18.53)$$

Это определяет

$$P(H) = A e^{-\mu \text{Tr}\{(\hat{H} - E_0 \hat{1})^2\}}, \quad (18.54)$$

что эквивалентно распределению ГОА (18.37) с соответствующим выбором  $A = \exp(-1 - \lambda)$  и  $\mu = N/a^2$ . В самом деле, ГОА дает равновесное распределение матричных элементов с минимумом доступной информации. Выбор  $a$  фиксирует локальный разброс по энергии  $I_2$  для данного фрагмента спектра.

## 18.6. Классы универсальности

ГОА отражает общие свойства систем с инвариантностью к обращению времени: для них возможен выбор вещественного базиса и использование вещественного симметричного гамильтониана. Соответствующая функция распределения инвариантна по отношению к группе ортогональных преобразований  $\hat{O}$  для базиса:

$$\hat{O}\hat{O}^T = 1. \quad (18.55)$$

Задав определенный начальный базис, мы пробегаем по всем возможным представлениям, применяя всевозможные преобразования  $\hat{O}$ . Как мы знаем, произвольная матрица  $N \times N$  этого типа имеет  $N + N(N-1)/2 = N(N+1)/2$  параметров. В ГОА зависимость от  $N(N-1)/2$  «угловых» параметров преобразования однородна и отделяется от нетривиальной зависимости (18.48) от  $N$  собственных значений.

Если инвариантность к обращению времени нарушена, например, в присутствии магнитного поля, мы уже не сможем обойтись вещественным базисом волновых функций. Фаза волновой функции всегда связана с движением, однако в  $\mathcal{T}$ -инвариантной ситуации столь же возможно и обратное по времени движение, и мы можем образовывать вещественные  $\mathcal{T}$ -инвариантные комбинации — такие, как стоячие волны. В отсутствие  $\mathcal{T}$ -инвариантности такой возможности нет, и в общем виде гамильтониан (рассмотренный в (18.4) и (18.5)) содержит и вещественную симметричную  $\hat{H}'$ , и мнимую антисимметричную  $\hat{H}''$  части. Соответствующая матрица имеет  $N(N+1)/2$  параметров для действительной части и  $N(N-1)/2$  (недиагональных) параметров для мнимой, всего  $N^2$  параметров.

В этой ситуации группой допустимых преобразований является группа  $\mathcal{U}(N)$  унитарных матриц  $\hat{U}$ :

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1. \quad (18.56)$$

Если потребовать инвариантности распределения  $P(H)$  по отношению к унитарным преобразованиям, то для воспроизведения выкладок, подобных

(18.27), нужно (для случая  $N = 2$ ) четыре независимых параметра — два вещественных диагональных элемента и комплексный элемент смешивания. В результате мы придем формально к тому же распределению (18.33), но с другой нормировкой — из-за другого числа параметров в евклидовой мере (18.39). Это определит гауссов *унитарный ансамбль* (ГУА).

При преобразовании к  $N$  собственным значениям  $E_k$  и  $N^2 - N$  угловым переменным,  $N^2 \times N^2$ -мерный якобиан  $J$ , аналогично (18.41), будет иметь  $N$  безразмерных столбцов (при дифференцировании по собственным значениям), а остальные  $N(N - 1)$  столбцов будут иметь размерность энергии. Следовательно,  $J$  является полиномом по  $E_k$  степени  $N(N - 1)$ . Этот полином, очевидно, симметричен по отношению к перестановке всех собственных значений. Как и раньше, якобиан обращается в нуль в точках вырождения, в которых хотя бы два собственных значения совпадают,  $E_i = E_j$ , и обратное преобразование не определено. Поскольку число пар уровней равно  $N(N - 1)/2$ , якобиан степени  $N(N - 1)$  должен содержать *квадраты* относительных расстояний  $E_i - E_j$ . Подобные рассуждения в случае ГОА (18.48) дали линейный закон расталкивания, здесь же мы приходим к *квадратичному*:

$$P_{\text{GUE}}(E_1, \dots, E_N) = \text{const}_N \prod_{ij, i < j} |E_i - E_j|^2 e^{-(N/a^2) \sum_k E_k^2}. \quad (18.57)$$

Результаты для ГОА и ГУА подтверждают простые выводы, ранее сформулированные при обсуждении пересечения уровней в разд. 10.5.

### Задача 18.5

Для случая  $N = 2$  получить ГУА-распределение для расстояний между ближайшими уровнями.

### Решение.

Интегрирование способом, аналогичным примененному в задаче 18.3, даёт

$$P(x) = 32 \frac{x^2}{\pi^2} e^{-(4/\pi)x^2}. \quad (18.58)$$

Наконец, упомянем используемый не столь часто *гауссов симплектический ансамбль* (ГСА). Он возникает в особом случае, когда имеется симметрия по отношению к обращению времени  $\mathcal{T}$ , но  $\mathcal{T}^2 = -1$ , и *полный угловой момент* может принимать только полуцелые значения (нечетное число фермионов). Из разделов (II.5.5) и (II.5.6) мы знаем, что энергии

сопряжённых по обращению времени орбит *вырождены*, но в *отсутствие вращательной симметрии* они принадлежат одному и тому же классу, в отличие от вращательно инвариантных систем, где партнеры характеризуются *различными* значениями  $\pm M$  точного интеграла движения  $J_z$  и должны относиться к разным классам. Тем самым, у нас возникают матрицы, которые в любом допустимом базисе содержат вырожденные дублеты сопряженных по обращению времени состояний. Преобразования, сохраняющие эту структуру, образуют *симплектическую* группу и могут быть представлены с помощью *кватернионов* (мы здесь делать этого не будем). Такая ситуация может быть реализована в конденсированных средах в присутствии электрического поля (магнитное поле нарушило бы  $\mathcal{T}$ -инвариантность). Другой пример можно найти в деформированных ядрах с нечётным числом нуклонов и отсутствием аксиальной симметрии, в результате чего проекции углового момента на любую связанную с ядром ось не сохраняются.

В случае ГСА мы имеем дело с дублетами вырожденных состояний. Взаимодействие между дублетами может смешивать их без нарушения вращательной инвариантности. Например, матричные элементы для взаимодействия между дублетом  $(1, \tilde{1})$  и дублетом  $(2, \tilde{2})$  должны удовлетворять соотношениям

$$H_{12} = H_{\tilde{2}\tilde{1}} = H_{\tilde{1}\tilde{2}}^*, \quad H_{1\tilde{2}} = H_{2\tilde{1}} = H_{\tilde{1}2}^*. \quad (18.59)$$

Для каждой пары дублетов мы поэтому имеем две пары комплексно сопряженных матричных элементов или четыре вещественных параметра; полное число параметров для  $N$  дублетов, включая  $N$  двукратно вырожденных энергий, равно  $N + 4N(N - 1)/2 = 2N^2 - N$ . Размерность якобиана равна числу столбцов  $2N(N - 1)$ , отвечающих производным по «угловым» параметрам, так что каждая пара разностей энергий входит в четвертой степени, и совместное распределение собственных значений принимает вид:

$$P_{\text{GSE}}(E_1, \dots, E_N) = \text{const}_N \prod_{ij(i < j)} |E_i - E_j|^4 e^{-(N/a^2) \sum_k E_k^2}. \quad (18.60)$$

Для всех *канонических гауссовых ансамблей* (ГОА, ГУА и ГСА) мы можем записать результат сходным образом с законом расталкивания  $|E_i - E_j|^\beta$ , , где  $\beta = 1, 2$  и  $4$  соответственно (нормировочная константа зависит от  $N$  и  $\beta$ ).

Мы пришли к выводу, что глобальная симметрия определяет классы *универсальности*. Ожидается, что в реальных системах при достаточно

высокой плотности уровней *локальная* спектральная статистика будет соответствовать одному из таких классов. При небольших возмущениях система может постепенно трансформироваться из одного класса в другой: включая магнитное поле, мы можем плавно перейти от ГОА к ГУА. Мы определили классы, исходя из симметрии гамильтониана. Можно построить классы, обсуждая и другие физические величины. Важным примером является *матрица рассеяния* [125]. Ввиду унитарности  $S$ -матрицы ее собственные значения — комплексные числа на окружности единичного радиуса. Статистика таких спектров определяется *циркулярными ансамблями*. Для систем с гамильтоновой динамикой есть прямая связь этих результатов с гауссовыми каноническими ансамблями. Однако  $S$ -матрицу можно обсуждать и в теориях, где гамильтониан даже и не определен явным образом.

## 18.7. Полукруговой закон

Для того чтобы пояснить основную идею более сложных приемов, используемых в теории случайных матриц, рассмотрим теперь задачу о средней *плотности уровней* для ГОА большой размерности  $N \rightarrow \infty$ . Сама по себе задача чистого ГОА имеет лишь академический интерес, поскольку *глобальное* поведение уровней в реальных системах отличается от ожидаемого в ансамблях случайных матриц (см. следующий раздел), но мы используем эту возможность для демонстрации принципов простейших *диаграммных* методов.

Рассмотрим ансамбль систем, описываемых гамильтонианами

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (18.61)$$

где  $\hat{H}_0$  и  $\hat{V}$  — большие  $N \times N$  эрмитовы матрицы,  $\hat{H}_0$  — постоянный оператор с определенными собственными значениями  $\varepsilon_k$ , в то время как  $\hat{V}$  содержит случайные параметры. Физические результаты получаются усреднением по ансамблю этих параметров. Для определенности мы предполагаем здесь, что  $\hat{V}$  принадлежит ГОА, и его вещественные некоррелированные матричные элементы  $V_{12}$  с нулевым средним значением распределены по нормальному закону и удовлетворяют (18.35) при подстановке  $H \rightarrow V$ . Из этого определения следует

$$\overline{(V^2)_{12}} = \frac{a^2}{4} \left(1 + \frac{1}{N}\right) \delta_{12}, \quad \overline{\text{Tr } V^2} = \frac{a^2}{4} (N + 1). \quad (18.62)$$

В пределе  $N \rightarrow \infty$  усредненный след в (18.62) пропорционален  $N$  (сравните с квадратом следа в (18.36)). Практически те же результаты получаются для ГУА, корреляционная функция двух матричных элементов для которого равна

$$\overline{V_{12}V_{34}} = \overline{V_{12}V_{43}^*} = \frac{a^2}{4N} \delta_{14}\delta_{23}, \tag{18.63}$$

и вместо (18.62) имеем

$$\overline{(V^2)_{12}} = \frac{a^2}{4}\delta_{12}, \quad \overline{\text{Tr } V^2} = \frac{a^2}{4}N, \tag{18.64}$$

так что в пределе больших  $N$  эти величины совпадают.

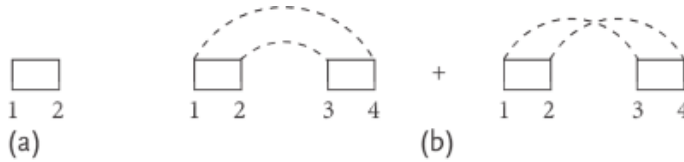


Рис. 18.5. Диаграммное представление: а — матричный элемент  $V_{12}$ ; б — корреляционная функция двух матричных элементов  $V$

Для представления усреднения более сложных выражений мы используем простые диаграммы (рис. 18.5). Пусть толстый прямоугольный блок (рис. 18.5, а) соответствует матричному элементу  $V_{12} = V_{21}^*$ . Свертки (18.62) или (18.63) показаны штриховыми линиями (рис. 18.5, б), связывающими вершины, которые, в соответствии с дельта-символами Кронекера, должны совпадать; второй (скрещённый) граф для ГУА отсутствует.

Оператор Грина  $\hat{G}(z)$  определяется как решение уравнения

$$\hat{G}(z)(z - \hat{H}) = \hat{1}. \tag{18.65}$$

Возьмем в качестве численного параметра  $z$  (с размерностью энергии) комплексное число; тогда решение уравнения (18.65)

$$\hat{G}(z) = \frac{1}{z - \hat{H}} \tag{18.66}$$

является хорошо определенным для эрмитова гамильтониана  $\hat{H}$ , имеющего только вещественный спектр, так что выражение (18.66) сингулярностей не имеет. Когда комплексная точка  $z$  приближается к оси вещественных

энергий, скажем, сверху,  $z \rightarrow E + i0$ , из тождества (6.26) следует

$$\hat{G}(E + i0) = \text{P.v.} \frac{1}{E - \hat{H}} - i\pi\delta(E - \hat{H}). \quad (18.67)$$

Мы построим диаграммную технику для вычисления усредненных по ансамблю матричных элементов функции Грина  $\overline{G_{12}(z)}$ .

Общая в таких случаях процедура начинается с нулевого приближения для функции Грина

$$\hat{G}^\circ(z) = \frac{1}{z - \hat{H}_0}, \quad (18.68)$$

так что

$$\hat{G}^{-1}(z) = \hat{G}^{\circ-1}(z) - \hat{V}. \quad (18.69)$$

Выбирая точку  $z$  вне вещественного спектра, где  $\hat{G}$  имеет полюса, мы можем произвести формальное разложение по степеням  $\hat{V}$

$$\hat{G} = \hat{G}^\circ + \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ + \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ + \dots \quad (18.70)$$

и усреднить его почленно. Это усреднение устранил все члены нечетных степеней  $\hat{V}$ , оставив лишь четные  $\hat{G}^{(2n)}$ :

$$\overline{\hat{G}} = \overline{\hat{G}^\circ} + \overline{\hat{G}^{(2)}} + \overline{\hat{G}^{(4)}} + \dots \quad (18.71)$$

Для понимания механизма усреднения рассмотрим член второго порядка:

$$\overline{\hat{G}^{(2)}} = \overline{\hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ}. \quad (18.72)$$

Среднее для матричного элемента (18.72) в соответствии с законом распределения для ГОА (18.35) принимает вид

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \sum_{3456} G_{13}^\circ G_{45}^\circ G_{62}^\circ \overline{V_{34} V_{56}} = \frac{a^2}{4N} \sum_{3456} G_{13}^\circ G_{45}^\circ G_{62}^\circ (\delta_{36} \delta_{45} + \delta_{35} \delta_{46}). \quad (18.73)$$

Суммирование (по 4 и 5) в первом члене приводит к следу  $\hat{G}^\circ$ , так что

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \frac{a^2}{4N} \sum_3 G_{13}^\circ \left[ (\text{Tr} \hat{G}^\circ) G_{32}^\circ + \sum_4 G_{43}^\circ G_{42}^\circ \right], \quad (18.74)$$

или, через произведения операторов,

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \frac{a^2}{4N} [(\text{Tr} \hat{G}^\circ)(\hat{G}^\circ \hat{G}^\circ)_{12} + (\hat{G}^\circ \hat{G}^{\circ T} \hat{G}^\circ)_{12}]. \quad (18.75)$$

Здесь метка  $T$  означает матричное транспонирование.

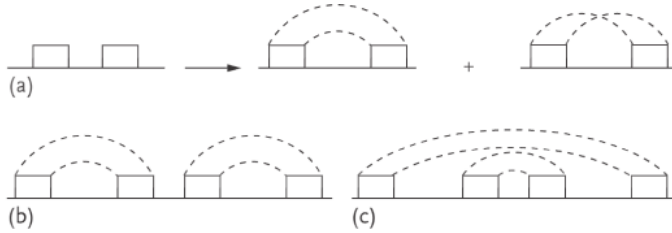


Рис. 18.6. Усреднение второго (a) и четвертого (b,c) порядков

Глядя на возникающие диаграммы (рис. 18.6, a, тонкой линией обозначены матричные элементы невозмущенной функции Грина), мы видим, что второй граф соответствует одной непрерывной линии  $1-3(=5)-4(=6)-2$ , составленной из чередующихся тонких и штриховых участков. В отличие от него первый граф содержит помимо линии от входа до выхода  $1-3(=6)-2$  отдельную часть  $4-5$  из тонкой линии, замкнутой штриховой линией, что означает совпадение концов и взятие следа. Вдали от сингулярностей след содержит  $N$  членов одного порядка величины. Мы предположим, что в пределе  $N \rightarrow \infty$

$$g^\circ(z) \equiv \frac{1}{N} \text{Tr} \hat{G}^\circ(z) \tag{18.76}$$

имеет асимптотически значение, не зависящее от  $N$ . Второй член в (18.75) имеет порядок  $1/N$ , и в асимптотике им можно пренебречь. Тем самым в обсуждаемом пределе мы получаем вклад, не зависящий от  $N$ :

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \frac{a^2}{4} g^\circ(G^\circ G^\circ)_{12}. \tag{18.77}$$

Для ГУА этот результат является точным, поскольку член с перекрёстными свёртками в этом случае отсутствует.

Теперь становится понятным, что в пределе  $N \rightarrow \infty$  в разложении (18.67) мы должны удерживать все члены, которые содержат число независимых следов, компенсирующее обратные степени  $N$ , возникающие из элементарных свёрток. В порядке  $2n$  мы имеем  $n$  свёрток, дающих множитель  $(a^2/4N)^n$ ; откуда видно, что для его компенсации нам нужно произведение  $n$  следов произведений функций Грина. Если из-за перекрестных свёрток число следов меньше требуемого, получающимся вкладом в асимптотическом пределе можно пренебречь.

**Задача 18.6**

Рассмотрите член четвёртого порядка и найдите вклады, которые выживают в пределе  $N \rightarrow \infty$ .

**Решение.**

Нам надо усреднить

$$\overline{G_{12}^{(4)}} = G_{13}^\circ G_{45}^\circ G_{67}^\circ G_{89}^\circ G_{10,2}^\circ \overline{V_{34} V_{56} V_{78} V_{9,10}}, \quad (18.78)$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Двенадцать членов отвечают шести различным способам спаривания матричных элементов  $V$ , в результате которых выживают только два (рис. 18.6,  $b, c$ ). Аналитически и для ГОА, и для ГУА

$$\overline{G_{12}^{(4)}} = \left(\frac{a^2}{4}\right)^2 \left\{ (G^\circ G^\circ G^\circ)_{12} (g^\circ)^2 + (G^\circ G^\circ)_{12} g^\circ \frac{1}{N} \text{Tr}(\hat{G}^\circ \hat{G}^\circ) \right\}. \quad (18.79)$$

Граф  $b$  на рис. 18.6 является итерацией вклада второго порядка  $a$ , тогда как граф  $c$  представляет вставку диаграммы второго порядка в самого себя.

При ближайшем рассмотрении становится ясно, что в асимптотике выживают лишь блоки «радуга», содержащие концентрические штриховые линии без пересечений. Для суммирования всех соответствующих вкладов мы введём усредненный массовый оператор  $M$ , который в каждом порядке пропорционален следу функции Грина

$$M_{12}^{(n)} = \frac{a^2}{4N} \text{Tr}(\hat{G}^{(n)}) \delta_{12}. \quad (18.80)$$

Тогда наши результаты для второго и четвертого порядков записываются как

$$\overline{\hat{G}^{(2)}} = \hat{G}^\circ \hat{M}^\circ \hat{G}^\circ, \quad (18.81)$$

$$\overline{\hat{G}^{(4)}} = \hat{G}^\circ \hat{M}^\circ \hat{G}^\circ \hat{M}^\circ \hat{G}^\circ + \hat{G}^\circ \hat{M}^{(2)} \hat{G}^\circ = \hat{G}^\circ \hat{M}^\circ \overline{\hat{G}^{(2)}} + \hat{G}^\circ \hat{M}^{(2)} \hat{G}^\circ. \quad (18.82)$$

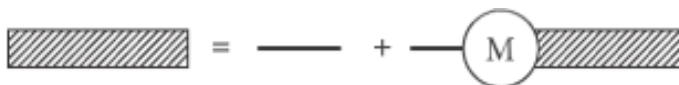


Рис. 18.7. Уравнение Дайсона для средней функции Грина и среднего массового оператора

Обозначим полную усредненную функцию Грина толстой линией (рис. 18.7). Любой граф (глядя, например, слева направо) начинается с тонкой линии  $\hat{G}^\circ$ . После этого идет неприводимая часть, охватываемая следом. Неприводимость в данном случае означает, что эту часть нельзя разорвать, разрезав лишь одну функцию Грина, так как она замкнута следом. После этого имеется полный набор графов, которые составляют ту же  $\hat{G}$ , как видно из первого члена в (18.82). Второй член в (18.82) дает следующее приближение для массового оператора, вставленного после левого  $\hat{G}^\circ$ . Это логическое тождество называется *уравнением Дайсона*

$$\overline{\hat{G}} = \hat{G}^\circ + \hat{G}^\circ \hat{M} \overline{\hat{G}}. \quad (18.83)$$

Такие уравнения всегда могут быть написаны для оператора типа *резольвенты* (18.66) в виде разложения (18.61). Отсюда непосредственно видно, что разложение (18.70) может быть представлено в виде (18.83) с  $\hat{M} \rightarrow \hat{V}$ . Но это не то, что мы подразумевали здесь, — наше уравнение (18.83) записано для *средних* величин, и массовый оператор (18.80) в этом случае представляет собой единичный оператор с коэффициентом, являющимся функционалом от усредненного оператора Грина. Собирая все порядки вместе, получим

$$\hat{M}(z) = \frac{a^2}{4N} \text{Tr} \overline{\hat{G}(z)}. \quad (18.84)$$

Формальное решение уравнения Дайсона может быть записано как

$$\overline{\hat{G}} = \left[ \hat{G}^{\circ-1} - \hat{M} \right]^{-1} \quad (18.85)$$

или, в нашем случае,

$$\overline{\hat{G}} = \left[ \hat{G}^{\circ-1} - \frac{a^2}{4N} \text{Tr} \overline{\hat{G}} \right]^{-1}. \quad (18.86)$$

Усредненный по гауссовому ансамблю оператор Грина в базисе регулярной части гамильтониана  $\hat{H}_0$  *диагонален*.

В результате получаем нелинейное уравнение для числовой функции (18.84):

$$M(z) = \frac{a^2}{4N} \text{Tr} \left[ \hat{G}^{\circ-1}(z) - M(z) \right]^{-1}. \quad (18.87)$$

Если невозмущенная функция Грина  $\hat{G}^\circ(z)$  известна (в терминах собственных значений  $\hat{H}_0$ ), массовый оператор может быть получен из этой функции соответствующим сдвигом  $z \rightarrow z - M(z)$  значения ее аргумента посредством

функционального уравнения Пастура:

$$M(z) = \frac{a^2}{4N} \text{Tr} \left[ \hat{G}^\circ(z - M(z)) \right]. \quad (18.88)$$

Особый случай вырождения  $\hat{H}_0$  при энергии  $E_0$  приводит к квадратичному уравнению

$$M(z) = \frac{a^2}{4} \frac{1}{z - E_0 - M(z)} \quad (18.89)$$

с решениями

$$M(z) = \frac{1}{2} \left[ z - E_0 \pm \sqrt{(z - E_0)^2 - a^2} \right]. \quad (18.90)$$

Это отвечает ГОА или ГУА с центроидом спектра (18.33) в  $E = E_0$ . Для следа оператора Грина аналогично (18.76) получим

$$g(z) \equiv \frac{1}{N} \text{Tr} \overline{\hat{G}(z)} = \frac{4}{a^2} M(z), \quad (18.91)$$

и, следовательно, знаменитую формулу Вигнера–Пастура:

$$g(z) = \frac{2}{a^2} \left[ z - E_0 - \sqrt{(z - E_0)^2 - a^2} \right], \quad (18.92)$$

где нами выбран знак минус в (18.90) для обеспечения правильного поведения  $g(z) \propto 1/z$  при  $|z| \rightarrow \infty$ , следующего из определения (18.76) для систем с конечной спектральной областью.

Полученный с помощью разложения (18.70) результат можно продолжить аналитически из асимптотической области  $z$  на вещественную ось. Таким образом, тождество (18.67) свяжет след (18.92) с плотностью уровней

$$\rho(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) = \text{Tr} \delta(E - \hat{H}). \quad (18.93)$$

Плотность уровней описывается мнимой частью следа  $g(z)$  в пределе  $z$ , стремящегося к вещественной оси:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \hat{G}(E + i0). \quad (18.94)$$

Плотность уровней, усредненная по ансамблю, определяется следом усредненного оператора Грина (18.91)

$$\overline{\rho(E)} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \overline{\hat{G}(E + i0)} = -\frac{N}{\pi} \text{Im} g(E + i0). \quad (18.95)$$

Для ГОА или ГУА в уравнении (18.92) мнимая часть появляется при извлечении квадратного корня, когда  $|E - E_0| < a$ :

$$\sqrt{(z - E_0)^2 - a^2} \Rightarrow i\sqrt{a^2 - (E - E_0)^2}. \quad (18.96)$$

В итоге мы приходим к *полукруговому закону* (см. *Wigner* [120, с. 145]):

$$\overline{\rho(E)} = N \frac{2}{\pi a^2} \sqrt{a^2 - E^2} \theta(a^2 - E^2), \quad (18.97)$$

где начало отсчета энергии выбрано при  $E_0 = 0$ , и ступенчатая функция  $\theta$  отражает появление резких границ усредненного энергетического спектра при  $N \rightarrow \infty$ . Величина  $a$ , введенная при определении корреляционных функций (18.35) или (18.64), есть *радиус полукруга*. Отметим, что  $a$  несколько по-разному связана с дисперсией исходных матричных элементов в ГОА и ГУА: имеем  $\overline{H_{kl}^2} = (a^2/4N)(1 + \delta_{kl})$  для ГОА и  $|\overline{H_{kl}}|^2 = a^2/4N$  для ГУА, где нет разницы между диагональными и недиагональными элементами.

Интересные физические результаты могут быть получены из *двухточечных корреляторов*, таких как, например,  $\overline{\rho(E)\rho(E')}$ . Здесь в принципе снова можно было бы воспользоваться методом  $1/N$ -разложения. Однако этот метод работает лишь при условии, что  $N|E' - E| \gg 1$ . На очень малых расстояниях между интересующими энергиями, при  $\Delta E \sim 1/N$  (т. е. порядка среднего межуровневого расстояния) разложение отказывается, и необходимо развитие более мощных и, очевидно, более сложных математических методов [126]. Стоит, однако, заметить, что в практических случаях при высокой плотности уровней столь малые межуровневые расстояния редко представляют интерес. Исключительным является случай низкоэнергетических *нейтронных резонансов* в тяжёлых ядрах (долгоживущие состояния, возбуждаемые при захвате медленных нейтронов сложными ядрами), которые индивидуально наблюдаемы как квазистационарные состояния компаунд-ядер. Эмпирически регулярные и хаотические бильiardы моделируются *микроволновыми резонаторами*, соединёнными с передающими и принимающими антеннами. В таких установках [127] уравнения Максвелла для электромагнитного поля внутри резонатора эквивалентны двумерному уравнению Шрёдингера. Сверхпроводящий материал резонатора сильно подавляет [128] диссипацию в его стенках.

## 18.8. Хаотические собственные функции

Уравнение (18.42) отражает однородность ГОА-распределения для двумерных случайных матриц по отношению к углу  $\theta$ : вероятность не за-

висит от ориентации базиса в параметрическом пространстве. Стартував с произвольного базиса и меняя угол, можно тем самым перебрать все ортогональные базисы.

В случае матриц  $2 \times 2$  ориентация параметризована одним углом, и единственным ограничением, налагаемым на амплитуды  $C_k^\alpha$  собственных векторов  $|\alpha\rangle$ ,  $\alpha = 1', 2'$  в базисе  $|k\rangle$ ,  $k = 1, 2$ ,

$$C_1^{1'} = \cos \vartheta, \quad C_2^{1'} = -\sin \vartheta; \quad C_1^{2'} = \sin \vartheta, \quad C_2^{2'} = \cos \vartheta, \quad (18.98)$$

остается их нормировка

$$\sum_k (C_k^\alpha)^2 = 1. \quad (18.99)$$

В этом случае совместная вероятность полного набора вещественных амплитуд  $C_k^\alpha$  для любого собственного вектора  $|\alpha\rangle$  определяется уравнением

$$P(\{C_k^\alpha\}) = A \delta\left(1 - (C_1^\alpha)^2 - (C_2^\alpha)^2\right), \quad (18.100)$$

где  $A$  — нормировочная константа.

Для нахождения вероятности *определенной компоненты*, например  $C_1^\alpha$ , нужно совместное распределение проинтегрировать по оставшейся компоненте  $C_2^\alpha$ :

$$P_1(C_1^\alpha) = \int_{-1}^1 dC_2^\alpha P(C_1^\alpha, C_2^\alpha) = 2A \int_0^1 dC_2^\alpha \delta\left(1 - (C_1^\alpha)^2 - (C_2^\alpha)^2\right). \quad (18.101)$$

Используя правила для интегралов с  $\delta$ -функциями, разд. I.3.3, получаем выражение (здесь  $\Theta$  — опять ступенчатая функция)

$$P_1(C) = \frac{A}{\sqrt{1-C^2}} \Theta(1-C^2), \quad (18.102)$$

справедливое для каждой из амплитуд  $C_k^\alpha$ . Наконец, последнее интегрирование определит константу  $A = 1/\pi$ . Получившееся распределение имеет интегрируемые особенности в точках  $C = \pm 1$ . Среднее значение каждого из весовых множителей  $C^2$  равно

$$\overline{C^2} = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 dC \frac{C^2}{\sqrt{1-C^2}} = \frac{1}{2}, \quad (18.103)$$

что следует из нормировки (18.99) и равной вероятности для каждой из двух амплитуд.

В общем  $N$ -мерном случае мы ожидаем, что подобным образом среднее значение весов  $(C_k^\alpha)^2$  будет порядка  $1/N$ . Амплитуды  $C_k$  для каждого собственного вектора  $|\alpha\rangle$  распределены равномерно по сфере единичного радиуса в  $N$ -мерном евклидовом пространстве

$$P_N(C_1, \dots, C_N) = A_N \delta\left(1 - \sum_{k=1}^N C_k^2\right). \quad (18.104)$$

Для нормировки этого распределения нужно вычислить  $N$ -мерный интеграл в правой части уравнения (18.104). Элемент объема в этом пространстве может быть разложен на произведение элемента телесного угла  $do_N$  и радиальной части:

$$d^N C = do_N R^{N-1} dR, \quad R^2 = \sum_{k=1}^N C_k^2. \quad (18.105)$$

Интегрирование по углам дает полный телесный угол в  $N$  измерениях, или площадь поверхности единичной сферы

$$S_N = \int do_N = \int dC_1 \cdots dC_N \delta\left(1 - \sum_{k=1}^N C_k^2\right). \quad (18.106)$$

В радиальном интеграле возникает множитель  $1/2$ , так как вклад даёт лишь положительный корень в дельта-функции или, если действовать формально ( $\xi = R^2$ ),

$$\int_0^\infty dR F(R) \delta(1 - R^2) = \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\sqrt{\xi}} F(\sqrt{\xi}) \delta(1 - \xi) = \frac{F(1)}{2}. \quad (18.107)$$

В итоге  $A_N = 2/S_N$ .

Таким образом, для компонент отдельной волновой функции распределение ГОА имеет вид

$$P_N(C_1, \dots, C_N) = \frac{2}{S_N} \delta\left(1 - \sum_{k=1}^N C_k^2\right). \quad (18.108)$$

**Задача 18.7**

Вычислите площадь  $S_N$  поверхности единичной сферы в  $N$ -мерном евклидовом пространстве.

**Решение.**

Простейший способ вычисления этой геометрической величины состоит в использовании дополнительного гауссова интеграла

$$I_N = S_N \int_0^\infty dR e^{-R^2} R^{N-1}. \quad (18.109)$$

Выражая через  $\Gamma$ -функцию, имеем

$$I_N = S_N \frac{1}{2} \Gamma(N/2). \quad (18.110)$$

С другой стороны, использование декартовых координат в  $C$ -пространстве и тождества (18.105) даёт

$$I_N = \int dO_N \int_0^\infty dR e^{-R^2} R^{N-1} = \int d^N C \exp\left[-\sum_{k=1}^N C_k^2\right]. \quad (18.111)$$

Здесь интеграл в действительности есть произведение  $N$  идентичных гауссовых одномерных интегралов

$$I_N = \left( \int_{-\infty}^{\infty} dC e^{-C^2} \right)^N = \pi^{N/2}. \quad (18.112)$$

Сравнивая (18.110) и (18.112), получаем

$$S_N = \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2)} = \frac{N\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2 + 1)}. \quad (18.113)$$

Откуда объем сферы

$$V_N = S_N \frac{R^N}{N} = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2 + 1)} R^N. \quad (18.114)$$

Отсюда следуют известные результаты:  $V_1 = 2R$  (расстояние между концами линейного отрезка),  $V_2 = \pi R^2$  (площадь круга),  $V_3 = (4/3)\pi R^3$  и т. д. Интересно, что при фиксированном радиусе  $R$  объем сначала растет с  $N$ , достигает максимума при  $N = 4$ , а затем быстро падает. Максимум площа-

ди сферы (18.113) отвечает  $N = 7$ . Можно понять, почему так получается: представьте себе  $N$ -мерный куб с ребром  $2R$  и вписанной внутрь сферой; каждая координата  $C$  при больших  $N$  в среднем равна  $R/\sqrt{N} \ll R$ , т. е. куб в действительности оказывается почти пустым.

### Задача 18.8

Найдите функцию распределения для отдельной компоненты  $N$ -мерной волновой функции в ГОА.

#### Решение.

Все компоненты равновероятны. Интегрируя (18.108) по  $C_2, \dots, C_N$ , мы получаем функцию распределения для  $C_1 \equiv C$ ,

$$P_1(C) = \frac{2}{S_N} \int dC_2 \cdots dC_N \delta\left(1 - C^2 - \sum_{k=2}^{\infty} C_k^2\right). \quad (18.115)$$

Как и в предыдущей задаче, интегрируем по углам и радиусу в  $(N-1)$ -мерном пространстве:

$$P_1(C) = \frac{2}{S_N} \int d\omega_{N-1} \int_0^{\infty} dR R^{N-2} \delta(1 - C^2 - R^2) = \frac{S_{N-1}}{S_N} (1 - C^2)^{(N-3)/2}. \quad (18.116)$$

Эволюция этой функции распределения как функции  $N$  показана на

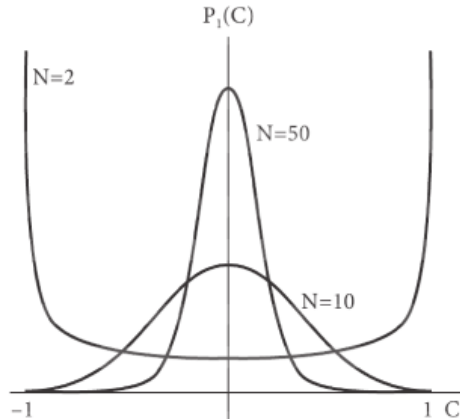


Рис. 18.8. Распределение (18.116) для различных значений  $N$

рис. 18.8.

На практике часто представляет интерес предел очень больших  $N$ . В нейтронных резонансах тяжелых ядер типичным является  $N \approx 10^{5-6}$ . В этом пределе общее выражение ГОА (18.116) упрощается. Поскольку  $C^2$  в среднем  $\propto 1/N$ , мы можем положить  $C^2 = x/N \ll x$  и перейти в (18.116) к пределу  $N \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned} (1 - C^2)^{(N-3)/2} &= \left(1 - \frac{x}{N}\right)^{(N-3)/2} = \sqrt{\left(1 - \frac{x}{N}\right)^N} \left(1 - \frac{x}{N}\right)^{-3/2} \Rightarrow \\ &\Rightarrow e^{-x/2} = e^{-NC^2/2}. \end{aligned} \quad (18.117)$$

Нормируя, мы получаем гауссово распределение

$$P_1(C) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-NC^2/2} \quad (18.118)$$

с ожидаемой дисперсией  $\overline{C^2} = 1/N$ . Нормировка может быть также получена непосредственно из (18.116) и (18.113), если воспользоваться для  $\Gamma$ -функции приближенной формулой Стирлинга (I.9.96).

## 18.9. Сложность и информационная энтропия

*Степень сложности* индивидуальной волновой функции  $|\alpha\rangle$  в конкретной системе может быть охарактеризована *информационной энтропией Шеннона*:

$$I_\alpha = - \sum_k \left(C_k^\alpha\right)^2 \ln \left(C_k^\alpha\right)^2. \quad (18.119)$$

Эта величина *не инвариантна* по отношению к ортогональным преобразованиям базиса  $|k\rangle$  — скорее, она выражает *относительную сложность* собственных состояний  $|\alpha\rangle$  по отношению к данному референтному базису. В задачах типа билиярда таким естественным референтным базисом является координатное представление, так что соответствующая информационная энтропия собственной волновой функции  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  определяется как

$$I_\alpha = - \int d^N r |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 \ln |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2. \quad (18.120)$$

В многочастичных системах обычно выбирается базис независимых частиц в среднем (самосогласованном) поле исходя из того, что самосогласованное поле по построению (гл. 13) включает в себя усредненные характеристики регулярного движения, отделяя их от хаотических флуктуаций, поэтому

оно обеспечивает удобную меру сложности. Информационную энтропию индивидуального состояния не следует путать с энтропией ансамбля (18.49).

Для самих базисных состояний  $I_\alpha = 0$  (тот же результат отсутствия сложности мы бы получили в базисе собственных состояний, где каждое собственное состояние имеет лишь одну компоненту). В противоположном случае, когда собственное состояние равномерно размазано по всему базису, со всеми компонентами в точности равными  $1/\sqrt{N}$ , информационная энтропия достигает своего максимума  $\ln N$ . Величина

$$I_\alpha = e^{I_\alpha} \quad (18.121)$$

играет роль *длины локализации*, которая показывает распределённость волновой функции по референтному базису. Начальные состояния полностью локализованы, тогда как равномерно размазанное состояние имеет  $N$  равновеликих компонент, где  $N$  — полная размерность пространства. Между ними имеются различные состояния  $|\alpha\rangle$  с  $N_\alpha < N$  главных (по значимости) компонент и  $I_\alpha \sim \ln N_\alpha$ .

### Задача 18.9

Вычислите среднее значение информационной энтропии в ГОА при больших  $N$ .

### Решение.

Аппроксимируем сумму интегралом, распространив в нем интегрирование до бесконечности:

$$\overline{\sum_k F(C_k^\alpha)} \Rightarrow N \int_{-\infty}^{\infty} dC P_1(C) F(C); \quad (18.122)$$

делая замену переменной  $C$  на  $x = C\sqrt{N/2}$  и используя распределение (18.118), получаем

$$\overline{I_\alpha} = -2N \sqrt{\frac{2N}{\pi}} \int_0^{\infty} dC C^2 \ln C e^{-NC^2/2} = \ln(\xi N), \quad (18.123)$$

где параметр локализации  $\xi$  определяется численным интегралом

$$\xi = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{8}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^2 \ln x e^{-x^2}\right) = 2e^{c-2} = 0,482. \quad (18.124)$$

Здесь  $c = 0,577$  — так называемая *константа Эйлера*. Таким образом, типичная локализационная длина  $\xi N \approx N/2$ . Меньшая величина, по срав-

нению с максимально возможным ее значением равным  $N$ , объясняется существующими в ансамбле флуктуациями и требованиями ортогональности различных собственных функций.

Другой полезной мерой сложности индивидуальной функции  $|\alpha\rangle$  является так называемая *обратная доля участия*

$$\Lambda_\alpha = \left[ \sum_k |C_k^\alpha|^4 \right]^{-1}. \quad (18.125)$$

Сумма здесь выражает средневзвешенный квадрат амплитуды  $C^2$  с весовой функцией, определяемой структурой состояния (вероятности даются теми же  $C^2$ ). Поскольку в хаотическом пределе  $C^2 = 1/N$ , величина (18.125) порядка  $N$ . Эту величину можно интерпретировать как число существенных компонент данной волновой функции  $|\alpha\rangle$  снова по отношению к исходному базису  $|k\rangle$ . Для типичных хаотических функций гауссово распределение амплитуд предсказывает

$$\bar{\Lambda} = \frac{N}{3}. \quad (18.126)$$

Во всяком случае, число главных (т. е. больших) компонент состояния  $|\alpha\rangle$  можно оценить как  $N_\alpha = 3\Lambda_\alpha$ . Обе меры, информационная энтропия  $I_\alpha$  и обратная доля участия  $\Lambda_\alpha$ , характеризуют более или менее одну и ту же физику, но  $I_\alpha$  более чувствительна к обилию малых компонент, тогда как  $\Lambda_\alpha$  — к главным компонентам. В пределе ГОА, как следует из (18.123, 18.124) и (18.126), отношение этих независимых мер сводится для типичных хаотических функций к универсальному числу

$$\frac{\exp(I_\alpha)}{\Lambda_\alpha} \Rightarrow 1,446, \quad (18.127)$$

и зависимость от размерности  $N$  исчезает.

Практический пример вычисления информационной энтропии всех 3276 состояний с определенными квантовыми числами  $J^\pi T = 2^+0$  в ядре  $^{28}\text{Si}$  показан на рис. 18.9. Состояния получены полной диагонализацией реалистической гамильтоновой матрицы в  $sd$ -оболочечной модели (гильбертово пространство для 6 протонов и 6 нейтронов в  $0d_{5/2}$ ,  $0d_{3/2}$  и  $1s_{1/2}$  орбиталях). Начальный базис  $|k\rangle$  отвечает приближению среднего поля, заданного тремя эмпирическими одночастичными энергиями. Конечный размер пространства определяет симметричную картину, наиболее сложные состояния

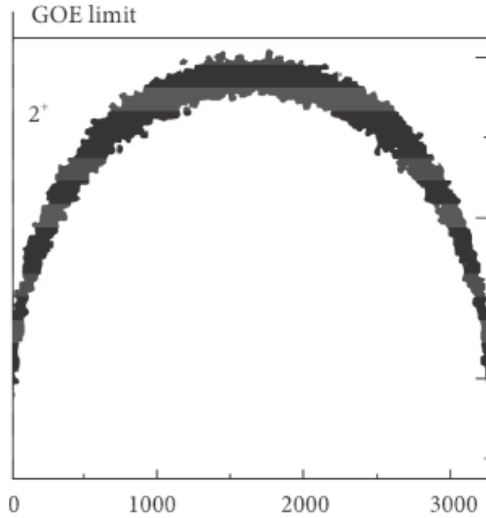


Рис. 18.9. Длина локализации (18.123), вычисленная в ядерной оболочечной модели [117] для класса состояний с угловым моментом  $J = 2$ , положительной четностью и изоспином  $T = 0$  в ядре  $^{28}\text{Si}$ ; состояния упорядочены по возрастанию энергии

находятся в середине спектра при наибольшей плотности уровней. Две особенности заслуживают упоминания: даже в максимуме информационная энтропия не достигает значения ГОА; зависимость  $I_\alpha$  оказывается гладкой функцией энергии возбуждения, что указывает на сильное смешивание, из-за чего смежные состояния изначально различной природы приобретают похожую структуру, или «выглядят одинаковыми» [129]. В этом заключается микроскопическое обоснование термодинамики: квантовый хаос делает макроскопические характеристики соседних состояний идентичными. Также показано, что в середине спектра отношение (18.127) близко к 1,44.

### 18.10. Распределение Портера—Томаса и связанные с ним распределения

Веса индивидуальных компонент

$$w_k^\alpha = (C_k^\alpha)^2 \quad (18.128)$$

могут быть извлечены из эксперимента, предназначенного для анализа сложного состояния. Например, вероятность захвата медленного нейтрона

тяжелым ядром в компаунд-состояние  $|\alpha\rangle$  пропорциональна перекрытию сложной волновой функции компаунд-состояния с начальным простым состоянием  $|k\rangle$ , которое в данном случае представляет собой нейтрон в континууме (в  $s$ -волне при очень низкой энергии  $E$ ) плюс ядро в основном состоянии. Это перекрытие определяет *нейтронную ширину*  $\Gamma_n^\alpha$ , которая входит в сечение образования компаунд-ядра (разд. 4.11). Для  $s$ -волны ширина пропорциональна  $\sqrt{E}$  (см. разд. 4.4). *Приведённая ширина*  $\gamma_\alpha = \Gamma_n^\alpha/\sqrt{E}$  определяется весом (18.128) для конкретного компаунд-состояния  $|\alpha\rangle$ . Поэтому мы ожидаем, что распределение приведённых нейтронных ширин будет близким к распределению  $P_w(w)$  типичных весов одиночных компонент в хаотической волновой функции нейтронного резонанса.

Распределение  $P_w(w)$  получается непосредственно из  $P(C)$  заменой переменных (кем-то было сказано, что теория вероятности является на самом деле наукой о замене переменных):

$$P_w(w) = 2P(C) \frac{dC}{dw}, \quad (18.129)$$

где множитель 2 возникает из-за того, что одно и то же  $w$  соответствует положительным и отрицательным амплитудам  $C$ . Вводя среднее значение  $\bar{w} = 1/N$ , мы приходим к распределению *Портера—Томаса* (ПТ):

$$P_{PT}(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{w}w}} e^{-w/2\bar{w}}, \quad (18.130)$$

совпадающему с  $\chi^2$ -распределением для одной степени свободы. Оно приближённо описывает распределение приведенных ширин нейтронных резонансов [10]. Распределение постепенно меняется с ростом энергии и уширением резонансов благодаря эффектам континуума [130], упомянутым в гл. 4.

### Задача 18.10

Найдите совместное распределение двух компонент  $C_1^\alpha$  и  $C_2^\alpha$  для (одной и той же) хаотической волновой функции. Используя этот результат в пределе  $N \rightarrow \infty$ , получите функцию распределения для средней ширины  $\Gamma = (w_1 + w_2)/2$ ,  $w_{1,2} = (C_{1,2}^\alpha)^2$ .

### Решение.

Тем же способом, что и раньше, находим

$$P(C_1, C_2) = \frac{S_{N-2}}{S_N} \left(1 - C_1^2 - C_2^2\right)^{N/2-2}. \quad (18.131)$$

В пределе больших  $N$  это сводится к произведению двух независимых гауссовых распределений (18.118). Переходя к новым переменным  $\Gamma$  и  $\xi = w_1 - w_2$ , получим

$$P(\Gamma, \xi) d\Gamma d\xi = \frac{1}{2\pi\bar{w}} e^{-\Gamma/\bar{w}} \frac{d\xi}{\sqrt{\Gamma^2 - \xi^2/4}} d\Gamma, \quad (18.132)$$

где, как и раньше,  $\bar{w} = 1/N$ . Интегрируя по  $\xi$  в пределах  $\pm 2\Gamma$ , приходим к чисто экспоненциальному распределению ( $\chi^2$ -распределение для двух степеней свободы):

$$P_\Gamma(\Gamma) = \frac{1}{\bar{w}} e^{-\Gamma/\bar{w}}. \quad (18.133)$$

**Дополнительная литература:** [77], [114], [117], [119], [120], [123], [125], [126], [131], [132]

Технические достижения последних лет дали возможность ставить эксперименты, о которых раньше можно было только думать. Реализация на практике мысленных экспериментов подтверждает правильность законов квантовой механики. Эти новые эксперименты так или иначе связаны с существованием квантовой запутанности...

*С. Газиорович. «Квантовая физика». 3-е изд.*

## Глава 19

### Квантовые запутанные состояния

#### 19.1. Квантовая запутанность

Понятие квантовой запутанности столь же старо, как сама квантовая механика. Однако лишь сравнительно недавно эта концепция попала в центр внимания. Основная причина — погоня за квантовым компьютером. Здесь мы затронем лишь несколько общих идей, относящихся к этой бурно развивающейся области.

Мы уже имели дело с запутанными состояниями во многих частях этого курса. Точнее, надо говорить о *запутанных подсистемах* в заданном состоянии квантовой системы. Фактически формализм сложения угловых моментов (см. гл. II.7) весь построен на запутанных состояниях — собственные состояния полного спина в случае двух связанных подсистем обычно оказываются запутанными состояниями. Пример того же типа можно найти в задаче I.7.2; рассматриваемые там состояния — это так называемые *запутанные состояния Белла*. Важно понимать, что понятие запутанности обычно относится к определенным *наблюдаемым* или к конкретным типам экспериментов.

Для простоты рассмотрим случай *двух подсистем*, где возможно измерение переменных, принадлежащих *одной из подсистем*. В случае двух спинов мы в принципе можем измерять спин либо первой, либо второй подсистемы, либо обеих сразу. Соответствующие процедуры представлены эрмитовыми операторами  $\hat{s}_i^{(1)}$ ,  $\hat{s}_k^{(2)}$  или их произведениями. В качестве других примеров можно рассмотреть распад заряженного пиона  $\pi^\pm \rightarrow \mu^\pm + \nu$ , фотодиссоциацию дейтрона  $d + \gamma \rightarrow p + n$ , рождение электрон-позитронной

пары двумя фотонами, или внутреннюю конверсию гамма-излучения из возбужденного состояния ядра в электрон-позитронную пару. Аналогично можно рассматривать двухфотонный переход в атоме с регистрацией поляризации одного или обоих фотонов. Для избежания ненужных усложнений мы начнем с примера двух *различимых* компонент пары, когда не возникает сомнений, чей же спин измеряется.

С независимыми (не запутанными) компонентами пары конечное спиновое состояние перед измерением есть простое *не связанное* произведение спиноров  $\chi_1^{(A)} \chi_2^{(B)}$ , где верхние индексы  $(A, B)$  помечают принадлежность к подсистеме, а нижние индексы  $(1, 2)$  характеризуют конкретное одночастичное спиновое состояние. Однако в случаях распада, упомянутых выше, конечное состояние может отражать ограничения, налагаемые законами сохранения. Тогда состояния продуктов распада могут оказаться *взаимосвязанными* даже при отсутствии прямого взаимодействия между ними, например, в смысле сложения угловых моментов. Если партнеры должны находиться в синглетном спиновом состоянии, конечная волновая функция должна иметь вид

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \chi_+^{(A)} \chi_-^{(B)} - \chi_-^{(A)} \chi_+^{(B)} \right). \quad (19.1)$$

Здесь одночастичные спиновые состояния заданы осью квантования  $z$ , хотя для синглетного спинового состояния волновая функция инвариантна к поворотам и поэтому при любом другом выборе оси квантования имела бы тот же вид.

Для спинового триплета такой инвариантности нет, но волновая функция  $\chi_{10}$  для полного спина  $S = 1$  и его  $z$ -проекции  $S_z = 0$  имеет в  $z$ -представлении вид, подобный (19.1), хотя и с противоположным знаком в суперпозиции

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \chi_+^{(A)} \chi_-^{(B)} + \chi_-^{(A)} \chi_+^{(B)} \right). \quad (19.2)$$

Для триплетного спинового состояния  $\chi_{11}$  запутывания нет, поскольку волновая функция является произведением  $\chi_+^{(A)} \chi_+^{(B)}$ . Формулировка понятия запутанности в широком смысле включает в себя как взаимообусловленность комбинированных состояний измеряемых подсистем, так и постановку соответствующих экспериментов. Состояние можно назвать запутанным, если по отношению к определенному типу экспериментам, производимым над подсистемами, его нельзя представить как простое произведение волновых функций подсистем. Измерение проекции спина первой подсистемы

в случае (19.2) неизбежно возмущает подсистему, непосредственно не измеряющуюся (*истинное запутывание*). Ниже, после рассмотрения примера квантовой телепортации, мы перейдем в разд. 19.3 к математическому определению запутанности.

## 19.2. Телепортация

Концепция запутанности проявляется в алгоритме, предложенном в [133] для передачи данного квантового состояния между двумя наблюдателями, — так называемой *квантовой телепортации*.

Мы стартуем с начального запутанного состояния двух наблюдателей  $A$  и  $B$ , традиционно называемых в литературе по квантовой информации *Элис (Alice)* и *Боб (Bob)* (тем самым мы продолжим использовать наши обозначения, введенные выше). Для простейших подсистем с двумя квантовыми состояниями, *кубитов*, предположим, что состояние пары кубитов имеет, например, вид

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\downarrow_A; \downarrow_B\rangle + |\uparrow_A; \uparrow_B\rangle \right). \quad (19.3)$$

Задача заключается в передаче неизвестного квантового состояния, *сообщения*,

$$|\psi\rangle = \alpha |\downarrow\rangle + \beta |\uparrow\rangle \quad (19.4)$$

от  $A$  к  $B$ . Измерение наблюдателем  $A$  свойств состояния  $|\psi\rangle$  разрушило бы когерентную комбинацию (19.4). Вместо этого  $A$  следует воспользоваться квантовой запутанностью с  $B$  в качестве средства коммуникации.

Полное состояние  $|\Psi\rangle$ , включая наблюдателей, содержит три кубита и может быть записано в виде

$$|\Psi\rangle = |\psi; \psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \alpha |\downarrow_m \downarrow_A \downarrow_B\rangle + \alpha |\downarrow_m \uparrow_A \uparrow_B\rangle + \beta |\uparrow_m \downarrow_A \downarrow_B\rangle + \beta |\uparrow_m \uparrow_A \uparrow_B\rangle \right). \quad (19.5)$$

В обозначениях для всех компонент спины упорядочены как |спин «сообщения»,  $A$ ,  $B$ ). Далее удобно разложить подсистему  $A$  + «сообщение» по полному базису запутанных состояний Белла для данной подсистемы

$$|\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\downarrow_m \downarrow_A\rangle \pm |\uparrow_m \uparrow_A\rangle \right), \quad (19.6)$$

$$|\zeta_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\downarrow_m \uparrow_A\rangle \pm |\uparrow_m \downarrow_A\rangle \right). \quad (19.7)$$

Из уравнений (19.5 – 19.7) находим

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = \frac{1}{2} & \left[ |\chi_+\rangle \left( \alpha |\downarrow_B\rangle + \beta |\uparrow_B\rangle \right) + |\chi_-\rangle \left( \alpha |\downarrow_B\rangle - \beta |\uparrow_B\rangle \right) \right. \\ & \left. + |\zeta_+\rangle \left( \alpha |\uparrow_B\rangle + \beta |\downarrow_B\rangle \right) + |\zeta_-\rangle \left( \alpha |\uparrow_B\rangle - \beta |\downarrow_B\rangle \right) \right]. \quad (19.8) \end{aligned}$$

На этом этапе  $A$  производит измерение в представлении состояний Белла (19.6, 19.7) и получает, с равной вероятностью, одно из этих состояний, которое отвечает выбору соответствующей линейной комбинации состояний кубита  $B$ , с теми же (с точностью до знака) коэффициентами, как и в неизвестном состоянии сообщения. Для каждого из четырех состояний  $|\chi_{\pm}\rangle$  и  $|\zeta_{\pm}\rangle$  результат измерения, произведенного наблюдателем  $A$  и переданный наблюдателю  $B$  посредством любого классического канала коммуникации, позволяет определить операцию, которую  $B$  должен применить, чтобы восстановить состояние сообщения (19.4) на своём кубите.

### Задача 19.1

Установите протокол унитарных операций, предписанных наблюдателю  $B$  для восстановления неизвестного состояния в каждом из четырех возможных исходов эксперимента, произведенного наблюдателем  $A$ .

#### Решение.

Способ (выраженный с помощью матриц Паули, которые должны быть применены к кубиту, находящемуся в распоряжении  $B$ ) не зависит от неизвестного состояния и может быть предписан заранее, обеспечивая успешную телепортацию:

$$|\zeta_+\rangle \Rightarrow \sigma_x, \quad |\chi_-\rangle \Rightarrow \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y, \quad |\chi_+\rangle \Rightarrow 1, \quad |\zeta_-\rangle \Rightarrow \sigma_z. \quad (19.9)$$

По завершению процесса начальное состояние в месте нахождения  $A$  разрушено, но оно полностью восстановлено в месте нахождения  $B$ . Поэтому теорема о запрете клонирования (гл. II.5) не нарушена. Исходная запутанность квантовых состояний  $A$  и  $B$  более не существует по завершению процедуры. Конечно, мы не передали физическую реализацию состояния  $|\psi\rangle$ , а лишь реконструировали идентичное состояние на другом кубите.

### 19.3. Математика запутанности

Для того чтобы ввести строгое определение собственно запутанности, рассмотрим снова две подсистемы  $A$  и  $B$  общей квантовой системы. Предположим, что размерности гильбертова пространства подсистем соответственно равны  $n_A$  и  $n_B$  и, для определенности,  $n_A \leq n_B$ .

Пусть  $|j_A\rangle$  и  $|k_B\rangle$  — произвольные полные ортогональные наборы состояний индивидуальных подсистем. Любое нормированное состояние составной системы может быть представлено в виде разложения

$$|\Psi\rangle = \sum_{jk} C_{jk} |j_A\rangle |k_B\rangle, \quad \sum_{jk} |C_{jk}|^2 = 1. \quad (19.10)$$

При истинной запутанности не существует базиса, в котором состояние  $|\Psi\rangle$  могло бы быть представлено в виде простого произведения  $|j_A\rangle |k_B\rangle$ . В общем случае не более чем  $n_A$  векторов *большой* подсистемы

$$|\psi_{j;B}\rangle = \sum_k C_{jk} |k_B\rangle \quad (19.11)$$

включены в это разложение. Набор состояний (19.11) может быть ортогонализирован и нормирован стандартными процедурами линейной алгебры (гл. I.6). Эффективно, в этом новом базисе процедура сведется к диагонализации матрицы  $C_{jk}$ , чья размерность не более, чем  $n_A \times n_A$ . Тогда исходное состояние представляется как

$$|\Psi\rangle = \sum_j C_j |j_A\rangle |j_B\rangle, \quad (19.12)$$

где каждое состояние первой подсистемы имеет во второй лишь одного партнера, обозначаемого тем же символом  $|j\rangle$ . Поскольку фазы новых базисных состояний произвольны и партнеры принадлежат к различным подсистемам, мы всегда можем подбором этих фаз ненулевые числа  $C_j$  сделать вещественными и положительными;  $\sum_j C_j^2 = 1$ . Обычно удобно расположить ненулевые числа в убывающем порядке,  $C_1 \geq C_2 \geq \dots \geq C_r$ , где  $r \leq n_A$  — *ранг* (иногда называемый *рангом Шмидта*) запутанности. Оставшиеся числа  $C_j$  равны нулю. Запутанность имеет место при  $r > 1$ .

Вспомним опять пример векторной связи угловых моментов двух подсистем. Для определённых квантовых чисел  $J, M$  системы в целом имеется однозначное взаимное соответствие между состояниями  $j_A$  с определенными значениями  $J_1, M_1$  и состояниями  $j_B$  второй подсистемы с квантовыми

числами  $J_2, M_2$ . Здесь механизм запутывания подчиняется требованию инвариантности по отношению к *общим* поворотам подсистем, безотносительно к их индивидуальным размерностям. Фазы коэффициентов Клебша—Гордана можно включить в определение соответствующих состояний, оставляя лишь их абсолютные значения так же, как это сделано в (19.12) для коэффициентов разложения  $C_j \geq 0$ .

Этот результат основан на *сингулярном разложении*. Любая (не обязательно эрмитовая и не обязательно квадратная) матрица  $\hat{C}$  с  $n_A$  строками и  $n_B$  столбцами и, в общем случае, с комплексными матричными элементами всегда может быть представлена в виде произведения трех матриц:

$$\hat{C} = \hat{U}_A \hat{D} \hat{U}_B^\dagger, \quad (19.13)$$

где  $n_A \times n_A$  матрица  $\hat{U}_A$  и  $n_B \times n_B$  матрица  $\hat{U}_B$  унитарны, тогда как  $\hat{D}$  — диагональная матрица с  $r$  упорядоченными положительными элементами  $r \leq n_A \leq n_B$  и нулевыми оставшимися. Ненулевые диагональные элементы  $C_j$  матрицы  $\hat{D}$  называются *сингулярными значениями*. Сингулярные значения  $C_j$  определены единственным образом, хотя имеется свобода выбора преобразований  $\hat{U}_A$  и  $\hat{U}_B$ . Разложение (19.13) является обобщением приведения эрмитовой матрицы к диагональному виду; однако в случае диагонализации пространства  $A$  и  $B$  совпадают, так что унитарные преобразования базиса должны быть одни и те же для  $A$  и  $B$ ,  $\hat{U}_A = \hat{U}_B$ , ранг  $r$  равен размерности,  $r = n_A = n_B$ , и знак вещественных собственных значений  $C_j$  определяется исходной матрицей.

Для формального доказательства (19.13) мы можем рассмотреть *эрмитову*  $n_B \times n_B$  матрицу  $\hat{C}^\dagger \hat{C}$ , имеющую  $n_B$  действительных неотрицательных собственных значений. Мы можем диагонализировать эту матрицу унитарным преобразованием  $\hat{T}$ :

$$\hat{T}^\dagger (\hat{C}^\dagger \hat{C}) \hat{T} = \hat{X}_{\text{diag}}, \quad (19.14)$$

где  $\hat{X}_{\text{diag}}$  диагональна, и мы упорядочим сначала неотрицательные матричные элементы в убывающем порядке, затем нулевые значения. Неотрицательный (левый верхний) угол матрицы  $\hat{X}_{\text{diag}}$  есть  $\hat{D}^2$ . Соответствующее разложение матрицы преобразования  $\hat{T}$  в верхней  $\hat{T}_u$  и в нижней  $\hat{T}_l$  частях приводит к

$$\hat{T}_u^\dagger \hat{C}^\dagger \hat{C} \hat{T}_u = \hat{D}^2, \quad \hat{C} \hat{T}_l = 0 = \hat{T}_l^\dagger \hat{C}^\dagger. \quad (19.15)$$

Матрица  $\hat{D}^2$  имеет хорошо определённую матрицу квадратного корня  $\hat{D}$  и обратную матрицу  $\hat{D}^{-1}$ . Теперь мы можем ввести  $\hat{U}_A = \hat{C} \hat{T}_u \hat{D}^{-1}$  таким

образом, что

$$\hat{U}_A \hat{D} \hat{T}_u^\dagger = \hat{C}. \quad (19.16)$$

Отождествляя  $\hat{T}_u$  с  $\hat{U}_B$ , мы удовлетворим (19.15) и все следствия (строго говоря, эти матрицы должны быть дополнены нулевыми строками и столбцами для обеспечения их унитарности в полном гильбертовом пространстве).

Если мы интересуемся лишь одной из запутанных подсистем, мы построим сначала полную матрицу плотности  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ , а затем *редуцированную матрицу плотности* (см. разд. 17.1), беря след по переменным партнера, например:

$$\rho_A = \text{Tr}_B (|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_j C_j^2 |j_A\rangle\langle j_A|. \quad (19.17)$$

Редуцированная матрица плотности  $\rho_B$  для второй подсистемы получается таким же образом и содержит те же числа  $C_j^2$ . Можно сказать, что базис разложения Шмидта есть *собственный базис* для обеих редуцированных матриц плотности  $\rho_A$  и  $\rho_B$ . Это напоминает ситуацию с симметрией частица-дырка (разд. 12.8) в конфигурациях оболочечной модели, которая справедлива независимо от размерностей взаимодополняющих пространств для частицы и дырки.

Замечательным свойством этого разложения является то, что энтропия Шеннона состояния (разд. 18.9)

$$I[\psi] = - \sum_j C_j^2 \ln(C_j^2) = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \ln \rho_B) \quad (19.18)$$

здесь совпадает с энтропией (фон Неймана) для ансамбля (разд. 18.6) редуцированных матриц плотности. Следовательно, эта величина может быть использована как мера степени запутанности. В случае двух подсистем с равными спинами  $j_A = j_B \equiv j$ , сложенными в полный спин  $J = 0$ , индекс суммирования в (19.18) — это проекция  $m$ , размерности равны,  $n_A = n_B = 2j + 1$ , и все сингулярные значения равны  $C_m = 1/\sqrt{2j + 1}$ . Это соответствует максимальной энтропии

$$I[\psi(J = 0)] = \ln(2j + 1) = \ln n_A = \ln n_B, \quad (19.19)$$

что сигнализирует о максимальной запутанности.

### Задача 19.2

Рассмотрите Бозе-газ  $N$  двухуровневых атомов при нулевой температуре. Газ взаимодействует с резонансным лазерным полем, которое вызывает

в атомах переходы между двумя внутренними состояниями. Постройте редуцированную матрицу плотности и найдите энтропию запутанности между двумя атомными Бозе-конденсатами.

### Решение.

Здесь удобно представление Швингера для угловых моментов (см. задачу П.5.2). Полный набор состояний всей системы, состоящей из  $N = N_A + N_B$  атомов, может быть охарактеризован либо распределением  $(N_A, N_B)$  по атомным состояниям  $A$  и  $B$ , либо квантовыми числами углового момента  $N_A = J + M$ ,  $N_B = J - M$

$$|N_A, N_B\rangle \equiv |JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J+M)!(J-M)!}} (a^\dagger)^{J+M} (b^\dagger)^{J-M} |0\rangle, \quad (19.20)$$

где  $a^\dagger$  и  $b^\dagger$  — операторы рождения атомов  $A$  и  $B$  соответственно. Эти состояния являются произведениями ортонормированных функций для парциальных конденсатов. Произвольная волновая функция двухкомпонентного конденсата (для фиксированного числа частиц  $N$  и потому  $J = N/2$ ) имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_M C_M |JM\rangle. \quad (19.21)$$

Редуцированная матрица плотности даётся выражением

$$\rho_A = \sum_{M=-N/2}^{N/2} |C_M|^2 |N_A\rangle \langle N_A|, \quad (19.22)$$

энтропия запутанности  $I[\psi]$  может быть записана как в (19.18); её максимум равен  $\ln(2J+1) = \ln(N+1)$ , как уже было упомянуто в (19.19). Максимум соответствует состоянию с однородным распределением атомных амплитуд по всем возможным заполнениям  $N_A = 0, 1, \dots, N$ .

## 19.4. Квантовые неравенства Белла

Запутанная система двух спинов  $1/2$  может служить хорошим примером для иллюстрации существования *корреляций* между результатами измерений, выполненных над двумя партнерами по запутыванию. Эти корреляции принимают форму особых неравенств. Мы рассмотрим простейшую форму такого неравенства.

Предположим, что наша аппаратура способна измерять переменные  $\hat{F}_\alpha^{(j)}$  для подсистем  $j = 1, 2$  (результаты могут быть обобщены на большее число подсистем). Можно считать, что эти операторы представляют компоненты спинов для определённой оси квантования, помеченной символом  $\alpha$ . Операторы, соответствующие различным подсистемам,  $j \neq j'$ , коммутируют. Для простоты предположим, что собственные значения всех операторов равны  $\pm 1$ , как это имеет место для матриц Паули  $\sigma_\alpha$ ; это означает, что

$$\left(\hat{F}_\alpha^{(j)}\right)^2 = 1. \quad (19.23)$$

Также можно предположить, что средние значения  $\langle F_\alpha^{(j)} \rangle$  всех этих величин в обсуждаемом состоянии принимают произвольные значения (они всегда лежат между  $-1$  и  $+1$  и могут быть равными нулю).

Выберем для двух подсистем независимо две пары операторов  $\alpha = 1, 2$  и построим специальным образом [134] четыре корреляционных функции (средние значения в данном состоянии полной системы):

$$C_{\alpha\beta} = \langle \hat{F}_\alpha^{(1)} \hat{F}_\beta^{(2)} \rangle, \quad \alpha, \beta = 1, 2. \quad (19.24)$$

Производя эксперименты над системой, мы можем определить среднее значение

$$R = C_{11} + C_{12} + C_{21} - C_{22}. \quad (19.25)$$

Неравенство

$$|R| \leq 2\sqrt{2} \quad (19.26)$$

следует алгебраически из определения (19.25) и нормировки (19.23). Действительно, из (19.23) следует, что

$$S \equiv \sum_{j=1,2} \sum_{\alpha=1,2} (\hat{F}_\alpha^{(j)})^2 = 4. \quad (19.27)$$

Простые алгебраические выкладки с учетом коммутативности переменных, относящихся к разным подсистемам, дают

$$S - R\sqrt{2} = \left\langle \left( F_1^{(1)} - \frac{1}{\sqrt{2}} [F_1^{(2)} + F_2^{(2)}] \right)^2 + \left( F_2^{(1)} - \frac{1}{\sqrt{2}} [F_1^{(2)} - F_2^{(2)}] \right)^2 \right\rangle. \quad (19.28)$$

Поскольку выражение (19.28) неотрицательно, из (19.27) непосредственно следует неравенство (19.26). Теперь можно показать, что верхняя граница

этого неравенства  $|R| = 2\sqrt{2}$  может быть достигнута в корреляционных экспериментах со спином.

### Задача 19.3

Рассмотрим систему со спином 0, распадающуюся на две частицы со спином  $1/2$  (19.1). Эксперименты 1 и 2, совершаемые над первой частицей, измеряют соответственно проекции её спина на оси, направленные под углами  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  по отношению к оси  $z$ . Таким же образом эксперименты над второй частицей измеряют её проекцию спина на оси, направленные под углами  $\beta_1$  и  $\beta_2$ . Вычислите величину  $R$  (19.25) и покажите, что предельное значение (19.26) достигается для некоторых выборов углов  $\alpha$  и  $\beta$ .

### Решение.

Каждое измерение даёт значение  $\pm 1$  оператора  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$  для данной частицы и заданного направления анализатора  $\mathbf{n}$ . Соответствующие вероятности в измерениях над обоими партнерами определяют величины  $C$  (19.24). Амплитуда вероятности прохождения через фильтр анализатора с углом  $\alpha$  для частицы, поляризованной вдоль оси  $z$ , равна  $\cos(\alpha/2)$  (разд. II.5.3). Для прохождения двух частиц находим

$$\langle \alpha(1)\beta(2) | \chi_{00} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \cos \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\pi - \beta}{2} - \cos \frac{\pi - \alpha}{2} \cos \frac{\beta}{2} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\beta - \alpha}{2}. \quad (19.29)$$

Таким образом, вероятность измерения обоих спинов вдоль соответствующих направлений равна

$$P(\alpha \uparrow, \beta \uparrow) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\alpha - \beta}{2}. \quad (19.30)$$

Таким же образом мы получим то же значение для

$$P(\alpha \downarrow, \beta \downarrow) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\alpha - \beta}{2} \quad (19.31)$$

и

$$P(\alpha \uparrow, \beta \downarrow) = P(\alpha \downarrow, \beta \uparrow) = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\alpha - \beta}{2}, \quad (19.32)$$

так что сумма четырех возможных исходов складывается в единицу. Поскольку произведения двух измеряемых результатов, нормированных условием (19.23), равны для четырех возможных случаев  $+1, +1, -1, -1$ , корреляционная функция (19.24) принимает вид

$$C(\alpha, \beta) = P(\alpha \uparrow, \beta \uparrow) + P(\alpha \downarrow, \beta \downarrow) - P(\alpha \uparrow, \beta \downarrow) - P(\alpha \downarrow, \beta \uparrow) =$$

$$= \sin^2 \frac{\alpha - \beta}{2} - \cos^2 \frac{\alpha - \beta}{2} = -\cos(\alpha - \beta). \quad (19.33)$$

Беря различные комбинации углов, находим величину (19.25):

$$R = -\cos(\alpha_1 - \beta_1) - \cos(\alpha_1 - \beta_2) - \cos(\alpha_2 - \beta_1) + \cos(\alpha_2 - \beta_2). \quad (19.34)$$

Выбирая, например, значения углов в эксперименте

$$\alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = \frac{\pi}{2}, \quad \beta_1 = \frac{\pi}{4}, \quad \beta_2 = -\frac{\pi}{4}, \quad (19.35)$$

получим предельное значение

$$R = -3 \cos \frac{\pi}{4} + \cos \frac{3\pi}{4} = -2\sqrt{2}. \quad (19.36)$$

## 19.5. Парадокс ЭПР(Б) и скрытые переменные

Квантовые неравенства Белла демонстрируют замечательную особенность квантовой механики, а именно — невозможность введения *локальных скрытых переменных*, которые «исправили» бы вероятностный характер квантовомеханических утверждений и придали бы этой теории классически детерминистское содержание.

Кажущаяся парадоксальность природы квантовой механики была подчеркнута в известной статье *Эйнштейна, Подольского и Розена* [135]. Парадокс был впоследствии облечен в более прозрачную форму в терминах запутанных спиновых состояний в работе *Бома* [136] и получил новый акроним (ЭПРБ). Проблема связана с неизбежностью корреляций между событиями, разделёнными пространственно таким образом, что исключается возможность связи между ними посредством обмена каким-либо физическим сигналом. Возвращаясь снова к эксперименту, рассматривавшемуся в задаче 19.3, мы можем установить независимо направления  $\alpha$  и  $\beta$  в измерительной аппаратуре на краях установки, которые мы можем выбрать сколь угодно далеко друг от друга. Запутанность спинов эволюционирует во времени согласно уравнению Шрёдингера. Если на левом краю зарегистрированный спин направлен вверх, и оси в анализаторах выбраны одинаковым образом на обоих краях, можно утверждать с определенностью, даже до любого измерения, что второй спин будет направлен вниз. Само по себе это утверждение означает лишь сохранение полного спина,

равного нулю. Однако ориентация оси левого анализатора может быть установлена лишь в самый последний момент — тем не менее, при получении положительного результата можно немедленно предсказать результат измерения в правом анализаторе.

Это выглядит как невидимая связь, информирующая удаленный спин о выбранном эксперименте с бесконечной скоростью. Более того, поскольку вторая частица «не знает», какой тип эксперимента будет произведен, кажется, что она заранее имеет определенные значения проекции спина на различные оси, «некий элемент физической реальности», по терминологии ЭПР. Но это находилось бы в очевидном противоречии с квантовой механикой, поскольку соответствующие операторы не коммутируют. Квантовомеханический результат не согласуется с какой-либо *локальной причинностью*, исходящей из предположения, что оба спина после распада начального состояния приобретают определенные направления, и эксперимент лишь обнаруживает их предопределенные значения. Ситуация ближе к «копенгагенской» интерпретации Бора, согласно которой измеренные значения динамических переменных не существуют до момента измерения, а, скорее, создаются в результате взаимодействия с измеряющим прибором. Локальность могла бы быть спасена, если бы квантовое состояние в действительности определялось бы посредством некоторых *скрытых переменных*, которые определяли бы реально существующую ориентацию обоих спинов в каждом конкретном измерении. Тогда квантовая механика стала бы статистической теорией, соответствующей вероятностному усреднению по лежащим в основе процессов скрытым параметрам. К счастью, вопрос может быть разрешен с помощью конкретных экспериментов. Такие эксперименты действительно были выполнены, и их результаты полностью подтвердили наличие квантовых нелокальных корреляций.

Следуя Беллу [137], можно показать, что определённые наблюдаемые корреляции между измеряемыми результатами в квантовой механике отличаются от предсказаний любой *локальной* теории, основанной на существовании скрытых параметров, обеспечивающих надлежащие исходы измерений во взаимно удаленных точках. Предположение о неких скрытых параметрах  $\lambda$  означает, что вероятности, подобные (19.30—19.32), задаются на скрытом уровне распределением  $f(\lambda)$ , которое определяет локально результаты экспериментов на обоих противоположных концах  $i$  и  $j$ :

$$P^{(ij)}(\alpha a, \beta b) = \int d\lambda f(\lambda) P^{(i)}(\alpha a; \lambda) P^{(j)}(\beta b; \lambda), \quad (19.37)$$

где  $P^{(i)}(\alpha a; \lambda)$  — вероятность результата  $a$  ( $\uparrow$  или  $\downarrow$  в случае спина) эксперимента, произведенного в точке  $i$  анализатором, ориентированным вдоль направления  $\alpha$  под локальным контролем переменных  $\lambda$ . Здесь мы предположим, что функция распределения  $f(\lambda)$  нормирована стандартным образом

$$\int d\lambda f(\lambda) = 1. \quad (19.38)$$

Теперь становится возможным показать формально, что предположение о скрытых переменных (19.37) противоречит квантовым неравенствам Белла. Вместо (19.33) мы теперь имеем

$$C(\alpha, \beta) = \int d\lambda f(\lambda) \left[ P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \uparrow; \lambda) + P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \downarrow; \lambda) - P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \downarrow; \lambda) - P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \uparrow; \lambda) \right] \quad (19.39)$$

или

$$C(\alpha, \beta) = \int d\lambda f(\lambda) \left[ P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) - P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda) \right] \left[ P^{(2)}(\beta \uparrow; \lambda) - P^{(2)}(\beta \downarrow; \lambda) \right]. \quad (19.40)$$

Эта величина определена усреднением по скрытым переменным произведений наблюдаемых, измеренных на противоположных концах, таких как

$$X^{(1)}(\alpha; \lambda) = P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) - P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda), \quad (19.41)$$

откуда

$$C(\alpha, \beta) = \int d\lambda f(\lambda) X^{(1)}(\alpha; \lambda) X^{(2)}(\beta; \lambda). \quad (19.42)$$

Поскольку исходы  $\uparrow$  и  $\downarrow$  являются взаимоисключающими и сумма их вероятностей равна единице, величины  $X$  ограничены  $\pm 1$ ,

$$|X^{(i)}(\alpha; \lambda)| \leq 1. \quad (19.43)$$

Теперь мы собираемся вычислить комбинацию  $R$  (19.25). Первая половина этой комбинации равна

$$C(\alpha_1, \beta_1) + C(\alpha_1, \beta_2) = \int d\lambda f(\lambda) X^{(1)}(\alpha_1; \lambda) [X^{(2)}(\beta_1; \lambda) + X^{(2)}(\beta_2; \lambda)]. \quad (19.44)$$

Переходя к абсолютным значениям и вспоминая неравенство (19.43), мы вместо (19.44) получим

$$|C(\alpha_1, \beta_1) + C(\alpha_1, \beta_2)| \leq \int d\lambda f(\lambda) |X^{(2)}(\beta_1; \lambda) + X^{(2)}(\beta_2; \lambda)|. \quad (19.45)$$

Тем же самым образом

$$|C(\alpha_2, \beta_1) - C(\alpha_2, \beta_2)| \leq \int d\lambda f(\lambda) |X^{(2)}(\beta_1; \lambda) - X^{(2)}(\beta_2; \lambda)|. \quad (19.46)$$

Поскольку все  $|X| \leq 1$ ,

$$|X^{(2)}(\beta_1; \lambda) + X^{(2)}(\beta_2; \lambda)| + |X^{(2)}(\beta_1; \lambda) - X^{(2)}(\beta_2; \lambda)| \leq 2 \quad (19.47)$$

(если одно абсолютное значение достигает 2, другое обращается в нуль). Уравнения (19.45–19.47) вместе с нормировкой (19.38) приводят к

$$|C(\alpha_1, \beta_1) + C(\alpha_1, \beta_2)| + |C(\alpha_2, \beta_1) - C(\alpha_2, \beta_2)| \leq 2, \quad (19.48)$$

и потому функция корреляции (19.25) удовлетворяет

$$|R| \leq 2 \quad (19.49)$$

в явном противоречии квантовому примеру (19.36). Насколько можно проследить происхождение разногласия, оно возникает с предположением факторизации вероятности (19.37) в произведение локальных вероятностей при одном и том же значении скрытых переменных. Квантовая механика подобной факторизации не допускает.

## 19.6. Экспериментальные тесты

Таким образом, введение скрытых переменных не согласуется с правилами обычной квантовой механики. Разница между (19.37) и ограничением (19.49) *конечна* и может быть проверена экспериментально, если экспериментальная погрешность может быть сделана меньше, чем эта разница.

Наиболее убедительные эксперименты [138–140] были выполнены *А. Аспектом* с сотрудниками, которые использовали схему на рис. 19.1, *a*. Вместо частиц со спином  $1/2$  в экспериментах изучался двухфотонный переход возбужденного  $^1S_0$ -состояния атома кальция с конфигурацией валентных электронов  $4p^2$  (рис. 19.1, *b*). Прямой однофотонный переход в основное

состояние с теми же квантовыми числами  $^1S_0$  в конфигурации  $4s^2$  невозможен ( $J = 0 \rightarrow J = 0$  однофотонные переходы запрещены, разд. II.14.7). Радиационный переход идет через два дипольных перехода в видимой области спектра через промежуточное состояние  $^1P_1$  с конфигурацией  $4s4p$ . Поскольку полный угловой момент, уносимый фотонами, должен быть равен нулю, их поляризации комплементарны (параллельны или перпендикулярны оси поляризатора), и мы имеем ситуацию, аналогичную парадоксу ЭПР(Б). Результаты оказываются в отличном согласии с квантовомеханическими предсказаниями о сильном нарушении неравенства (19.49).

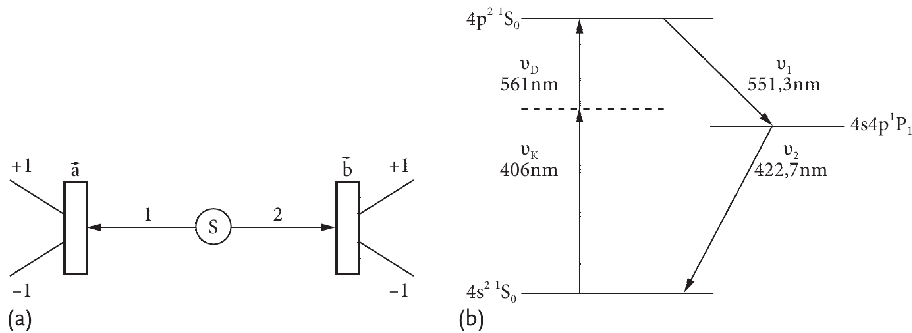


Рис. 19.1. Схематический вид эксперимента Аспекта (a), фотонная поляризация измеряется вдоль направлений **a** и **b**; соответствующие уровни атома кальция (b) [138], [139]

Последний из трех экспериментов этой группы [140] исключил возражения, относящиеся к возможной связи измерений на противоположных концах, которая могла бы устанавливаться из-за предварительной фиксации направлений измеряемой поляризации (углов  $\alpha$  и  $\beta$ ). Теперь экспериментаторы использовали переключатель, менявший эти направления за времена *более короткие*, чем время распространения фотона до места регистрации. Тем самым нормальная (*субсветовая* — более медленная, чем скорость света) передача сигнала была исключена. Еще более сильные выводы в том же направлении были получены в более поздних экспериментах с использованием массивных частиц и фотонов, см., например, [141, 142].

## 19.7. Декогерентность и парадокс измерения

В обычной копенгагенской парадигме акт измерения приводит к *коллапсу* волновой функции в новую, являющуюся собственной функцией измеря-

емой переменной, с собственным значением, устанавливаемым исходом измерения. Тем самым акт получения физической информации о реальном состоянии системы лежит в некотором смысле вне квантовомеханического формализма.

Классический экспериментальный прибор определяет, какую величину предполагается измерить. В этом смысле набор возможных исходов и соответствующих собственных состояний задан. Волновая функция изучаемого состояния является, вообще говоря, суперпозицией разных функций базиса. Эксперимент проектирует исходную комбинацию на одну из функций этого набора, и коэффициенты суперпозиции проявляют себя (точнее, квадраты их абсолютных значений) как частоты различных результатов в серии идентичных экспериментов. В этой формулировке не обсуждается «механизм» коллапса. В сущности, мы отказываемся от включения структуры *классического* прибора в формализм. В то же самое время законы квантовой механики, включая соотношение неопределённостей, могут быть справедливы лишь при условии, что классический прибор сам подчиняется этим соотношениям (вспомним эксперимент с двумя щелями из гл. I.1). Такая ситуация выглядит логически неудовлетворительной, особенно на современном уровне экспериментального искусства.

Мы уже знаем (гл. I.14), что при определенных условиях вполне *макроскопические* объекты могут вести себя так, как будто они находятся в одном квантовом состоянии. Сверхтекучесть и сверхпроводимость являются наиболее известными примерами такой макроскопической когерентности. С использованием современной квантовой оптики стало возможным наблюдение типичных квантовых явлений в атомных пучках на макроскопических масштабах. Поэтому макроскопический размер системы не является достаточной причиной для объявления ее поведения классическим (что, кстати, могло быть проблематичным на раннем этапе становления квантовой механики). С другой стороны, если измеряющий прибор также полностью квантовый, весь процесс измерения должен описываться уравнением Шрёдингера, и никакого «коллапса» волновой функции быть не может. Квантовая суперпозиция будет эволюционировать далее в соответствии с гамильтонианом, что с неизбежностью включает взаимодействие системы с измеряющей аппаратурой.

Здесь мы подошли к *парадоксу измерения* [143]. В какой-то момент эксперимент должен закончиться с определённым значением измеряемой физической величины. Это означает, что сделан выбор среди многих допустимых исходов. Но волновая функция описывает потенциальную возможность сразу всех допустимых результатов. Каким-то образом все, кроме одного,

должны быть отброшены, а проявится с определенной вероятностью лишь один выбранный как реальное значение без интерференции с другими частями волновой функции. Если бы мы продолжали дальнейшую эволюцию полной волновой функции, процесс измерения, казалось бы, должен длиться до бесконечности.

Поскольку разнообразные экспериментальные тесты квантовой механики неизменно подтверждают ее справедливость, нам нужно попытаться разрешить этот парадокс непротиворечивым рассмотрением процесса взаимодействия изучаемой системы с прибором и, в более широком смысле, — с *внешней средой*. Мы не станем обсуждать здесь более эзотерические версии — как, например, интерпретацию квантовой механики, основанную на так называемой *множественности историй/миров* [144]; согласно этой идее, квантовая суперпозиция выживает во всех актах измерений, и все альтернативы воплощаются во множестве параллельных историй, но мы можем наблюдать лишь одну, связанную с нашим миром; каждый акт измерения расщепляет волновую функцию, порождая все новые и новые параллельные вселенные. Как сказал Ричард Фейнман, «это возможно, но я бы был не очень счастлив от этого» [110].

Хотя проблема не может рассматриваться как полностью решенная, похоже, что физическое прояснение этого парадокса весьма возможно. Проследим это на простом эксперименте, являющемся прототипом общей ситуации [145]. Рассмотрим *дихотомическую* квантовую переменную (имеющую лишь два собственных значения,  $\pm 1$ ) — такую, как спин частицы. Мы начнем с уравнения Шрёдингера, порождающего, как результат предшествующей эволюции, суперпозицию

$$|\psi\rangle = a_+|+\rangle + a_-|-\rangle. \quad (19.50)$$

Затем эта частица взаимодействует с детектором — например, прибором типа Штерна—Герлаха. Учитывая это взаимодействие, мы приходим к *общей* волновой функции частицы и детектора; последний, также являясь квантовой системой, описывается набором волновых функций  $|D\rangle$ . В их объединенном гильбертовом пространстве мы до взаимодействия имеем *некоррелированную* полную волновую функцию

$$|\Psi\rangle = |\psi; D\rangle. \quad (19.51)$$

В ответ на взаимодействие правильно ведущий себя детектор послушно совершает переход в состояния, *скоррелированные* со спином частицы:  $|D^{(+)}\rangle$  для состояния спина  $|+\rangle$  и  $|D^{(-)}\rangle$  для состояния спина  $|-\rangle$ . Клас-

сически указатель на приборе выбрал бы правое или левое отклонение от нулевого положения. На этом этапе, еще описываемом стандартной квантовой механикой, мы имеем *запутанное* состояние, присущее системе и измерительной аппаратуре:

$$|\Psi'\rangle = a_+|+; D^{(+)}\rangle + a_-|-; D^{(-)}\rangle. \quad (19.52)$$

Состояние (19.52) содержит в полной мере эффекты квантовой интерференции. Расщепленные части волновой функции могут быть снова сведены в исходное состояние, ничего *необратимого* не произошло. Если, например, состояние (19.50) отвечает комбинации  $\chi_{00}$  (19.1), она вращательно инвариантна и может быть записана таким же образом и по отношению к оси квантования  $x$ . Соответственно, (19.52) показало бы детектор в состояниях

$$|D^{(\pm x)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|D^{(+)}\rangle \pm |D^{(-)}\rangle); \quad (19.53)$$

«детектор еще даже не определил набор альтернатив!» [145].

Это как раз то место, где мы должны вспомнить, что а) детектор является макроскопическим телом с огромным числом степеней свободы и б) он никогда полностью не изолирован от окружающей среды. Если мы исключим случаи идеальной макроскопической когерентности, данное положение указателя не определяет однозначно внутреннее состояние детектора. Имеется огромное количество микроскопических состояний детектора и окружающей среды  $|D^{(\pm)}; i\rangle$ , которые *совместимы* с конкретным показанием  $D^{(\pm)}$  стрелки детектора и позволяют нам однозначное получение того или иного результата измерения. Это именно то, что мы можем принять в качестве определения *классического прибора*, предполагаемого в копенгагенской интерпретации Бора. Тем самым, (19.52) было бы лучше записать в виде чрезвычайно огромной суперпозиции

$$|\Psi'\rangle = a_+ \sum_i C_i^{(+)}|+; D^{(+)}; i(+)\rangle + a_- \sum_i C_i^{(-)}|-; D^{(-)}; i(-)\rangle, \quad \sum_i |C_i^{(\pm)}|^2 = 1. \quad (19.54)$$

Поскольку в конце мы фиксируем лишь положение указателя и усредняем по ненаблюдаемым переменным внутренней структуры и окружающей среды, мы переходим к описанию в терминах *матрицы плотности*. Рассматривая результат эволюции и динамического взаимодействия все еще

как чистое квантовое состояние, мы имеем

$$\hat{\rho} = |\Psi'\rangle\langle\Psi'|. \quad (19.55)$$

Если мы введем четыре матрицы плотности для аппаратуры и окружающей среды

$$\rho_{ij}^{\alpha\beta} = C_i^{(\alpha)} C_j^{(\beta)*}, \quad \alpha, \beta = \pm, \quad (19.56)$$

полная матрица плотности (19.55) принимает вид

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha\beta;ij} a_\alpha a_\beta^* \rho_{ij}^{\alpha\beta} |\alpha; D^{(\alpha)}; i(\alpha)\rangle\langle\beta; D^{(\beta)}; i(\beta)|. \quad (19.57)$$

Пусть теперь это сложнейшее чистое состояние эволюционирует. Спустя очень короткое *время декогерентности* фазы огромного числа коэффициентов  $C_i^{(\alpha)}$  приведут к полной потери памяти о начальном состоянии. Единственными величинами, выжившими после усреднения, останутся

$$\overline{\rho_{ij}^{\alpha\beta}} = |C_i^{(\alpha)}|^2 \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta}. \quad (19.58)$$

Фактически мы приходим к *редуцированной* матрице плотности

$$\hat{\rho}_{\text{red}} = \sum_{\alpha;i} |a_\alpha|^2 |C_i^{(\alpha)}|^2 |\alpha; D^{(\alpha)}; i(\alpha)\rangle\langle\alpha; D^{(\alpha)}; i(\alpha)|, \quad (19.59)$$

где недиагональные по отношению к внутренним переменным матричные элементы отсутствуют. Окончательно нашим результатом измерения является только показание указателя, независимо от всех других переменных. Это можно выразить взятием следа по переменным  $i(\alpha)$ :

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{\text{pointer}} &= \text{Tr}_{i(\alpha)} \hat{\rho}_{\text{red}} = \sum_{\alpha} |a_\alpha|^2 |D^{(\alpha)}\rangle\langle D^{(\alpha)}| = \\ &= |a_+|^2 |D^{(+)}\rangle\langle D^{(+)}| + |a_-|^2 |D^{(-)}\rangle\langle D^{(-)}|. \end{aligned} \quad (19.60)$$

Декогерентность, неизбежная при работе с классическими приборами, разрушает суперпозицию и оставляет нам лишь классические вероятности взаимоисключающих результатов. Эти вероятности, однако, полностью определены исходным квантовым состоянием. Тем самым данный механизм разрешает парадокс измерения.

Нужно подчеркнуть аналогию подобных аргументов с тем, что традиционно заложено в основу статистической механики. Декогерентность необра-

тима, после потери памяти о фазах в суперпозиции полное состояние (19.54) восстановить невозможно. Хорошо известное возражение *Лоймидта*, что рост энтропии в процессе стремления к статистическому равновесию должен быть обратим ввиду симметрии микроскопической динамики относительно обращения времени, было парировано в свое время *Л. Больцманом* предложением обратить все микроскопические импульсы в макроскопической системе. В нашем сценарии энтропия также возрастает при переходе от чистого состояния к статистической смеси, но процесс обратить нельзя. Даже бесконечно малая ошибка в фазе суперпозиции разрушит обратимость.

**Дополнительная литература:** [137], [143], [146], [147], [148], [149].

## Список литературы

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. — 5-е изд. — М. : Физматлит, 2012. — Т. 1.
2. Голдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. — М. : Мир, 1967.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. — 8-е изд. — М. : Физматлит, 2012. — Т. 2.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — 6-е изд. — М. : Физматлит, 2004. — Т. 3.
5. Мотт Н. Ф., Месси Г. С. У. Теория атомных столкновений. — М. : Мир, 1969.
6. Taylor J.R. Scattering theory: the quantum theory of nonrelativistic collisions. — N.Y. : Wiley, 1972.
7. Itzykson C., Zuber J.-B. Quantum Field Theory. — N.Y. : McGraw-Hill, 1980.
8. Блатт Дж., Вайскопф В. Теоретическая ядерная физика. — М. : Иностран. лит., 1954.
9. Epeibaum E. // Prog. Part. Nucl. Phys. — 2006. — Vol. 57. — P. 654.
10. Bohr A., Mottelson B.R. Nuclear Structure. — Singapore : World Scientific, 1998. — Vol. 1, 2.
11. Бете Г., Моррисон Ф. Элементарная теория ядра. — М. : Иностран. лит., 1958.

12. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. — М. : Мир, 1969.
13. Newton R.G. Scattering Theory of Waves and Particles. — Mineola : Dover, 2002.
14. Hartmann S. // Studies in History and Philosophy of Modern Physics. — 2001. — Vol. 32B. — P. 267.
15. The Analytical S-Matrix / R.J. Eden, P.V. Landshoff, D.I. Olive, J.C. Polkinghorne. — Cambridge : Cambridge University Press.
16. Lovesey S.W. Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter. — Oxford, 1986. — Vol. 72.
17. Baron E., Predazzi V. High Energy Particle Diffraction. — Berlin : Springer, 2002.
18. Pilkuhn H.M. Relativistic Particle Physics. — N.Y. : Springer, 1979.
19. Baz' A.I. // JETP. — 1959. — Vol. 36. — P. 1762.
20. Misra B., Sudarshan E.C.G. // J. Math. Phys. — 1977. — Vol. 18. — P. 756.
21. W.H. Itano, D.J. Heinzen, J.J. Bollinger, D.J. Wineland // Phys. Rev. A. — 1990. — Vol. 41. — P. 2295.
22. Fischer M.S., Gutiérrez-Medina B., Raizen M.G. // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 87. — P. 040402.
23. Hotta M., Morikawa M. // Phys. Rev. A. — 2004. — Vol. 69. — P. 052114.
24. D.A. Dicus, W.W. Repko, R.F. Schwitters, T.M. Tinsley // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 65. — P. 032116.
25. Mahaux C., Weidenüller H.A. Shell Model Approach to Nuclear Reactions. — Amsterdam : North Holland, 1969.
26. Wigner E.P. // Phys. Rev. — 1946. — Vol. 70. — P. 606.
27. Lane A.M., Thomas R.G. // Rev. Mod. Phys. — 1958. — Vol. 30. — P. 257.
28. Ericson T., Mayer-Kuckuk T. // Ann. Rev. Nucl. Sci. — 1966. — Vol. 16. — P. 183.

29. Вайнберг С. Квантовая теория поля. — М. : Физматлит, 2003. — Т. 1.
30. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. — М : Наука, 1981.
31. В.М. Spicer, Н.Н. Thies, J.E. Baglin, F.R. Allum // Austr. J. Phys. — 1958. — Vol. 11. — P. 298.
32. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. — 4-е изд. — М. : Физматлит, 2002.
33. Kerker M. The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation. — N.Y. : Academic Press, 1969.
34. Ter-Mikaelian M.L. High Energy Electromagnetic Processes in Condensed Media. — N.Y. : John Wiley&Sons, 1972.
35. Фейнман Р. Квантовая электродинамика. — Новокузнецк : Новокузнецкий ФМИ, 1998.
36. Wigner E.P. Symmetries and Reflections. — Bloomington : Indiana University Press, 1967.
37. Бьёркен Дж.Д., Дрелл С.Д. Релятивистская квантовая теория. — М. : Наука, 1978. — Т. 2.
38. Foldy L.L., Wouthuysen S.A. // Phys. Rev. — 1950. — Vol. 78. — P. 29.
39. Bethe H.A., Salpeter E.E. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms. — Berlin : Springer, 1957.
40. Зельдович Я.Б., Попов В.С. // УФН. — 1971. — Т. 105. — С. 403.
41. Majorana E. // Nuov. Cim. — 1937. — Vol. 14. — P. 171.
42. J.H. Christensen, J. Cronin, V. Fitch, R. Turlay // Phys. Rev. Lett. — 1964. — Vol. 13. — P. 138.
43. Fleischer R. // Phys. Rep. — 2002. — Vol. 370. — P. 537.
44. Giunti C., Kim C.W. Fundamentals of Neutrino Physics and Astrophysics. — Oxford : Oxford University Press, 2007.
45. Gonzales-Garcia M.C., Maltoni M. // Phys. Rep. — 2008. — Vol. 460. — P. 1.

46. Davis R. // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 97. — P. 766.
47. Holstein B.R. *Weak Interactions in Nuclei.* — Princeton : Princeton University Press, 1989.
48. Schechter J., Valle J.W.F. // *Phys. Rev. D.* — 1982. — Vol. 25. — P. 2951.
49. Fortson E.N., Lewis L.L. // *Phys. Rep.* — 1984. — Vol. 113. — P. 289.
50. Bilenky S.M., Petcov S.T. // *Rev. Mod. Phys.* — 1987. — Vol. 59. — P. 671.
51. Kayser B. *The Physics of Massive Neutrinos.* — Singapore : World Scientific, 1989.
52. Grotz K., Klapdor H.V. *The Weak Interaction in Nuclear, Particle and Astrophysics.* — Bristol : Adam Hilger, 1990.
53. Sozzi M.S. *Discrete Symmetries and CP Violation.* — Oxford : Oxford University Press, 2008.
54. Peshkin M. // *Found. Phys.* — 2006. — Vol. 36. — P. 19.
55. Pethik C.J., Smith H. *Bose–Einstein Condensation in Dilute Bose Gases.* — Cambridge : Cambridge University Press, 2002.
56. Schwinger J., Teller E. // *Phys. Rev.* — 1937. — Vol. 52. — P. 286.
57. R.B. Sutton, T. Hall, E.E. Anderson et al. // *Phys. Rev.* — 1947. — Vol. 72. — P. 1147.
58. Hanbury-Brown R., Twiss R.Q. // *Phil. Mag.* — 1954. — Vol. 45. — P. 663.
59. G. Goldhaber, S. Goldhaber, W. Lee, A. Pais // *Phys. Rev.* — 1960. — Vol. 120. — P. 300.
60. Hanbury-Brown R. *The Intensity Interferometer.* — N.Y. : Taylor and Francis, 1974.
61. Boal D.H., Gelbke C.-K., Jennings B.K. // *Rev. Mod. Phys.* — 1990. — Vol. 62. — P. 553.
62. Baym G. // *Acta Phys. Pol.* — 1998. — Vol. B29. — P. 1839.
63. Wiedemann U.A., Heinz U. // *Phys. Rep.* — 1999. — Vol. 319. — P. 145.

64. Silverman M.P. Quantum Superposition. — Berlin : Springer, 2008.
65. Greiner W., Müller B. Quantum Mechanics: Symmetries. — Berlin : Springer, 1989.
66. Weinberg S. Quantum Field Theory. — Cambridge : Cambridge University Press, 1995. — Vol. 1.
67. Schumm B.A. Deep Down Things: The Breaking Beauty of Particle Physics. — Berlin : Springer, 2004.
68. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. — М. : Физматлит, 2004. — Т. 9. — Часть 2. Теория конденсированного состояния.
69. Scerri E. The Periodic System, its Story and its Significance. — Oxford : Oxford University Press, 2007.
70. Reimann S., Manninen M. // Rev. Mod. Phys. — 2002. — Vol. 74. — P. 1283.
71. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. — М. : Физматлит, 2010. — Т. 5 — Часть 1. — С. 616.
72. Kohn W., Sham L.J. // Phys. Rev. — 1965. — Vol. 140. — P. A1133.
73. Dreizler R.M., Gross E.K.U. Density Functional Theory. — Berlin : Springer, 1990.
74. S.A. Fayans, S.V. Tolokonnikov, E.L. Trykov, D. Zawischa // Nucl. Phys. — 2000. — Vol. A676. — P. 49.
75. Hoddeson L., Baym G., Eckert M. // Rev. Mod. Phys. — 1987. — Vol. 59. — P. 287.
76. Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. — 1964. — Vol. 136. — P. B864.
77. Lee P.A., Ramakrishnan T.V. // Rev. Mod. Phys. — 1985. — Vol. 57. — P. 287.
78. T. Gorin, T. Prosen, T.H. Seligman, M. Žnidarič // Phys. Rep. — 2006. — Vol. 435. — P. 33.
79. Dyson F. // Phys. Rev. — 1956. — Vol. 102. — P. 1217.
80. Bohm D., Pines D. // Phys. Rev. — 1953. — Vol. 92. — P. 609.

81. Fröhlich H. // *Phys.Rev.* — 1950. — Vol. 79. — P. 845.
82. Абрикосов А.А. Основы теории металлов. — М. : Наука, 1987.
83. Karbach M., Müller G. // *Comput. Phys.* — 1997. — Vol. 11; 12, P. 565 (1998). — P. 36.
84. Pines D. *Elementary Excitation in Solids.* — N.Y. : Westview Press, 1999.
85. Shevchuk N.J. // *J. Phys.* — 1974. — Vol. C7. — P. 3630.
86. Беляев С. Т. // *ЖЭТФ.* — 1958. — Т. 34. — С. 417.
87. Henshaw D.G., Woods A.D.B // *Phys. Rev.* — 1961. — Vol. 121. — P. 1266.
88. Pitaevskii L., Stringari S. *Bose–Einstein Condensation.* — Oxford : Clarendon Press, 2003.
89. Bogoliubov N.N. // *J. Phys. USSR.* — 1947. — Vol. 11. — P. 23.
90. Ландау Л.Д., Лифшиц Е. М. *Гидродинамика.* — 5-е изд. — М., 2014. — Т. 6.
91. Anderson M.H., et al. // *Science.* — 1995. — Vol. 265. — P. 198.
92. Питаевский Л.П. // *ЖЭТФ.* — 1961. — Т. 4. — С. 646.
93. Gross E.P. // *J. Math. Phys.* — 1963. — Vol. 5. — P. 195.
94. Lieb E.H., Seiringer R., Yngvason J. // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61. — P. 043602.
95. Geltman S. // *EPL.* — 2009. — Vol. 87. — P. 13001.
96. Фейнман Р. *Статистическая механика.* — М. : Мир, 1972.
97. Тилли Д.Р., Тилли Дж. *Сверхтекучесть и сверхпроводимость.* — М. : Мир, 1977.
98. Tilley D.R., Tilley J. *Superfluidity and Superconductivity.* — 2nd edition. — Bristol : Adam Hilger, 1986.
99. Wilks J. *The Properties of Liquid and Solid Helium.* — Oxford : Clarendon Press, 1967.

100. Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J.R. // *Phys. Rev.* — 1957. — Vol. 106. — P. 162.
101. Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J.R. // *Phys. Rev.* — 1957. — Vol. 108. — P. 1175.
102. Osheroff D.D, Gully W.J., Richardson R.C., Lee D.M. // *Phys. Rev. Lett.* — 1973. — Vol. 29. — P. 920.
103. Leggett A.J. // *Rev. Mod. Phys.* — 1975. — Vol. 47. — P. 331.
104. Racah G. // *Physica.* — 1952. — Vol. 18. — P. 1097.
105. Belyaev S.T. // *Kgl. Dansk. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* — 1959. — Vol. 31. — P. No. 11.
106. Schrieffer J.R. *Theory of Superconductivity.* — N.Y. : Westview Press, 1999.
107. Regal C.A., Greiner M., Jin D.S. // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92. — P. 040403.
108. Horoi M., Zelevinsky V. // *Phys. Rev. C.* — 2007. — Vol. 75. — P. 054303.
109. Brink D.M., Broglia R.A., Petruccione F. *Superfluidity: Pairing in Finite Systems.* — Cambridge : Cambridge University Press, 2005.
110. Feynman R. // *Int. J. Theor. Phys.* — 1982. — Vol. 21. — P. 467.
111. Гельфанд Я.М., Любошиц В.Л., Подгорецкий М.И. *Парадокс Гиббса и тождественность частиц в квантовой механике.* — М. : Наука, 1975.
112. Breuer H.-P., Petruccione F. *The Theory of Open Quantum Systems.* — Oxford : Oxford University Press, 2002.
113. Evans D.J., Searles D.J. // *Adv. Phys.* — 2002. — Vol. 51. — P. 1529.
114. Schuster H.G., Just W. *Deterministic Chaos.* — Weinheim : Wiley, 2005.
115. Haake F. *Quantum Signatures of Chaos.* — Berlin : Springer, 2004.
116. Bohigas O., Giannoni M.-J., Schmit C. // *Phys. Rev. Lett.* — 1984. — Vol. 52. — P. 1.
117. Zelevinsky V., Brown B.A., Frazier N., Horoi M. // *Phys. Rep.* — 1996. — Vol. 276. — P. 85.

118. Rahav S., Richman O., Fishman S. // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36. — P. L529.
119. Brody T.A., Flores J., French J.B. et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 1981. — Vol. 53. — P. 385.
120. *Statistical Theories of Spectra: Fluctuations* / Ed. by C.E. Porter. — N.Y. : Academic Press, 1965.
121. Laprise J.F., Hosseinizadeh A., Lamy-Poirer A. et al. // *Phys. Lett. A.* — 2010. — P. 2000.
122. Huu-Tai P. Chau, Smirnova N.A., Isacker P. Van // *J. Phys. A.* — 2002. — Vol. 35. — P. L199.
123. Flambaum V.V., Gribakina A.A., Gribakin G.F., Kozlov M.G. // *Phys. Rev. A.* — 1994. — Vol. 50. — P. 267.
124. Ohya M., Petz D. *Quantum Entropy and Its Use.* — Berlin : Springer, 1993.
125. Dyson F.J. // *J. Math. Phys.* — 1962. — Vol. 3. — P. 140, 157, 166, 1199.
126. Guhr T., Müller-Groeling A., Weidenmüller H.A. // *Pys. Rep.* — 1998. — Vol. 299. — P. 189.
127. Stockmann H.-J. *Quantum Chaos.* — Cambridge : Cambridge University Press, 1999.
128. Alt H., Gräf H.-D., Hofferbert R. et al. // *Phys. Rev. E.* — 1996. — Vol. 54. — P. 2303.
129. Percival I.C. // *J. Phys. B.* — 1973. — Vol. 6. — P. L229.
130. Sokolov V.V., Zelevinsky V.G. // *Nucl. Phys. A.* — 1989. — Vol. 504. — P. 562.
131. Gutzwiller M.C. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics.* — N.Y. : Springer, 1990.
132. Dyson F.J., Mehta M.L. // *J. Math. Phys.* — 1963. — Vol. 4. — P. 701, 713.
133. C.H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 70. — P. 1895.

134. Clauser J., Horne M., Shimony A., Holt R. // *Phys. Rev. Lett.* — 1969. — Vol. 23. — P. 880.
135. Einstein A., Podolsky B., Rosen N. // *Phys. Rev.* — 1935. — Vol. 47. — P. 777.
136. Bohm D., Bub J. // *Rev. Mod. Phys.* — 1966. — Vol. 38. — P. 453.
137. Bell J.S. *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics.* — Cambridge : Cambridge University Press, 1993.
138. Aspect A., Grangier P., Roger G. // *Phys. Rev. Lett.* — 1981. — Vol. 47. — P. 460.
139. Aspect A., Grangier P., Roger G. // *Phys. Rev. Lett.* — 1982. — Vol. 49. — P. 91.
140. Aspect A., Dalibard J., Roger G. // *Phys. Rev. Lett.* — 1982. — Vol. 49. — P. 1804.
141. Rowe M.A., Kielpinski D., Meyer V. et al. // *Nature.* — 2001. — Vol. 409. — P. 791.
142. Gröblacher S., Paterek T., Kaltenbaek R. et al. // *Nature.* — 2007. — Vol. 446. — P. 871; corrigendum: *Nature*, 449, 252 (2007).
143. Rae A.I.M. *Quantum Pysics: Illusion or Reality?* — Cambridge University Press, 1986.
144. *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics.* — Princeton : Princeton University Press, 1973.
145. Zurek W.H. // *Physics Today.* — 1991. — Vol. October 1991. — P. 36.
146. Clauser J., Shimony A. // *Rep. Prog. Phys.* — 1978. — Vol. 41. — P. 1881.
147. Shimony A. // *Sci. Am.* — 1988. — Vol. 256. — P. 46.
148. Weinberg S. // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 62. — P. 485.
149. Ghose P. *Testing Quantum Mechanics on New Ground.* — Cambridge : Cambridge University Press, 1999.



## Предметный указатель

СРТ-инвариантность, 211  
 СР-нарушение, 229  
 $\mathcal{T}$ -сопряжённое состояние, 413

### А

адроны, 272  
 аналитичность матрицы рассеяния,  
     52  
 аннигиляция, 159  
 антикоммутатор, 287  
 античастицы, 147, 163  
 ассоциативное рождение, 225  
 атомные конфигурации, 306

### Б

Бартлетта оператор, 234  
 Белла неравенства, 520  
 бета-распад безнейтринный двой-  
     ной, 223  
 БКШ теория, 413, 428  
 БКШ-БЭК переход, 439  
 Боголобова преобразование, 401,  
     426, 438  
 Бозе-газ, 389

Бозе—Эйнштейновский конденсат,  
     389, 410  
 бозоны, 237, 281  
 Брейта—Вигнера формула, 115

### В

Вайскопфа время, 123  
 Вейля уравнение, 212  
 Вигнера кристалл, 355  
 Вигнера распределение межуров-  
     невых расстояний, 489  
 Вигнера—Пастура формула, 501  
 Вигнера—Эккарта теорема, 460  
 Вика теорема, 290  
 вторичное квантование, 283

### Г

гауссов ортогональный ансамбль,  
     484  
 гауссов симплектический ансамбль,  
     493  
 гауссов унитарный ансамбль, 493  
 Гейзенберга оператор, 234  
 гелия атом, 318  
 Гиббса парадокс, 233, 467

гигантский резонанс, 156  
 Голдстоуновская мода, 363, 367,  
 373, 399

**Д**

де Гааза—ван Альфена эффект, 337  
 декогерентность, 531  
 дельта-резонанс, 277  
 детальное равновесие, 107  
 Дирака уравнение  
   билинейные коварианты, 176  
   Дирака матрицы, 165  
   дрожащее движение, 187  
   зарядовое сопряжение, 169  
   ковариантная форма, 165  
   критический заряд, 202  
   кулоновское поле, 198  
   Лоренца преобразование, 172  
   магнитное поле, 203  
   основные свойства, 163  
   свободное движение, 181  
   сохранение тока, 168  
   тонкая структура, 192  
   центральное поле, 194  
 длина когерентности, 439  
 длина рассеяния, 253

**З**

запутанность, 513  
 зарядовая независимость, 266  
 зарядовая симметрия, 265  
 Зенона парадокс, 117  
 зеркальная симметрия, 266

**И**

изобары, 265  
 изоспин, 263  
 изоспиновые мультиплеты, 267  
 изотоны, 265  
 изотопы, 265

интегрируемое движение, 475  
 информационная энтропия, 507, 519

**К**

калибровочная инвариантность, 150  
 квазибозоны, 416  
 квазиспин, 422  
 квантовые состояния  
   квазистационарные, 124  
   смешанные, 447  
 кварковая структура, 273  
 киральность, 213  
 классическая статистика, 237  
 Клейна—Гордона уравнение, 143  
 комбинированная инверсия, 209  
 коммутаторы, 286  
 комплексный потенциал, 28  
 Комптона эффект, 154  
 корреляционная дырка, 333  
 Крамерса вырождение, 429  
 кристаллическая решётка, 359  
 кубиты, 515  
 Кубо формулы, 474  
 Купера эффект, 435

**Л**

Ландау критерий сверхтекучести,  
 400  
 Ландау уровни, 336  
 линейный отклик, 470  
 Липмана—Швингера уравнение,  
 35  
 лоренц-инвариантность, 136

**М**

магноны, 377  
 Майорана оператор, 234  
 Майорана частицы, 209, 223  
 макроскопическая когерентность,  
 426

матрица плотности, 447, 531  
 мезоатом, 151, 247

## Н

нейтрино  
     безмассовый предел, 214  
     осцилляции, 219  
     поколения, 214  
 неразличимость частиц, 233  
 несохранение чётности, 217  
 неэкспоненциальный распад, 118

## О

обменное взаимодействие, 312  
 оболочечная структура, 324  
 обратная доля участия, 509  
 обращение времени, 77, 210, 414  
 опасные диаграммы, 436  
 операторы плотности, 292  
 орбитальный диамагнетизм, 336  
 ортоводород, 251  
 ортогелий, 319

## П

параводород, 251  
 парагелий, 319  
 Пастура уравнение, 501  
 Паули блокировка, 417, 424  
 Паули обобщённый принцип, 270  
 Паули принцип исключения, 184,  
     241, 304  
 Паули уравнение, 190  
 перестановочная симметрия, 234,  
     281  
 Питаевского—Гросса уравнение, 410  
 плазменная частота, 346  
 плазменные колебания, 383  
 позитроний, 159  
 полукруговая плотность уровней,  
     502

поляризационная длина, 347  
 поляризационная матрица плотно-  
     сти, 457  
 поляризация рассеянных частиц,  
     463  
 Портера—Томаса распределение,  
     511  
 приближение случайных фаз, 382  
 Пуассона распределение межуров-  
     невых расстояний, 482

## Р

рассеяние  
     S-матрица, 23  
     азимутальная асимметрия, 74  
     амплитуда, 30  
     борновский ряд, 37  
     борновское приближение, 25,  
         76, 84  
     брэгговское рассеяние, 99  
     граничное условие, 30  
     Грина функция, 34  
     дифракция, 87  
     длина рассеяния, 62  
     квазиклассическое, 80  
     классическое, 18, 79  
     когерентное, 99  
     коэффициент прилипания, 89  
     многоканальное, 106  
     многократное, 95  
     низкие энергии, 54  
     оптическая модель, 92  
     парциальные волны, 47  
     поглощение, 29  
     поляризация, 75  
     прицельный параметр, 19  
     резонансное, 65  
     сдвиги фаз, 51  
     сечение, 18, 49

спин-орбитальное взаимодействие, 70  
 унитарность, 23, 47  
 фазы рассеяния, 61  
 эйкональное приближение, 86  
 эффект тени, 51  
 эффективный радиус, 69  
 расталкивание уровней, 479, 488  
 реакции  
   борновское приближение, 108  
   закон  $1/v$ , 110  
   каналы, 103  
   пороги, 111  
   при низких энергиях, 110  
   резонансные, 115  
   составное ядро, 129  
   угловой момент и чётность, 127  
   ширина резонанса, 126  
   экзотермические, 104  
   эндотермические, 104  
 регенерация каонов, 229  
 ротоны, 397

**С**

сверхтекучесть, 399  
 сеньорити, 417  
 сингулярное разложение, 518  
 скрытые параметры, 523  
 Слэтера детерминант, 240, 288, 304  
 собственный базис, 450, 453  
 составное ядро, 156  
 спаривательное взаимодействие, 421  
 спектральная статистика, 478  
 спин-тензоры, 459  
 спиральность, 188  
 спонтанное нарушение симметрии,  
   363, 399  
 статистическая энтропия, 465  
 странность, 224

**Т**

телепортация, 515  
 тензор проводимости, 472  
 тепловое равновесие, 453  
 Томаса–Ферми приближение, 342  
 Томаса–Ферми приближение, 411  
 точность воспроизведения, 371

**У**

унитарное преобразование, 290

**Ф**

Ферми импульс, 328  
 Ферми поверхность, 329, 414  
 Ферми-газ, 327  
 фермионы, 237, 281  
 Фока пространство, 282  
 Фолди–Вотхойзена преобразование,  
   190  
 фон Неймана уравнение, 469  
 фононы, 364  
 фононы в Бозе-газе, 397  
 фотопоглощение, 153  
 функционал плотности, 356

**Х**

хаотическая динамика, 475  
 Хартри приближение, 339  
 Хартри–Фока приближение, 347  
 химический потенциал, 394, 430  
 Холстейна–Примакова преобразование,  
   377, 416  
 Хунда правила, 320

**Ц**

цветовая симметрия, 271

**Ч**

частично-дырочная симметрия, 322  
 частично-дырочная симметрия, 419

частично–дырочные возбуждения,  
377

чётность, 207

числа заполнения, 241, 284

### **Ш**

Шмушкевича фабрика, 275

### **Э**

Эйнштейна–Подольского–Розена  
парадокс, 523

электронная экранировка, 347

электрон-фононное взаимодействие,  
383

энергетическая щель, 433

энтропия ансамбля, 491, 519

энтропия смешивания, 466

### **Ю**

Юкавы потенциал, 145

### **Я**

ядерная деформация, 326